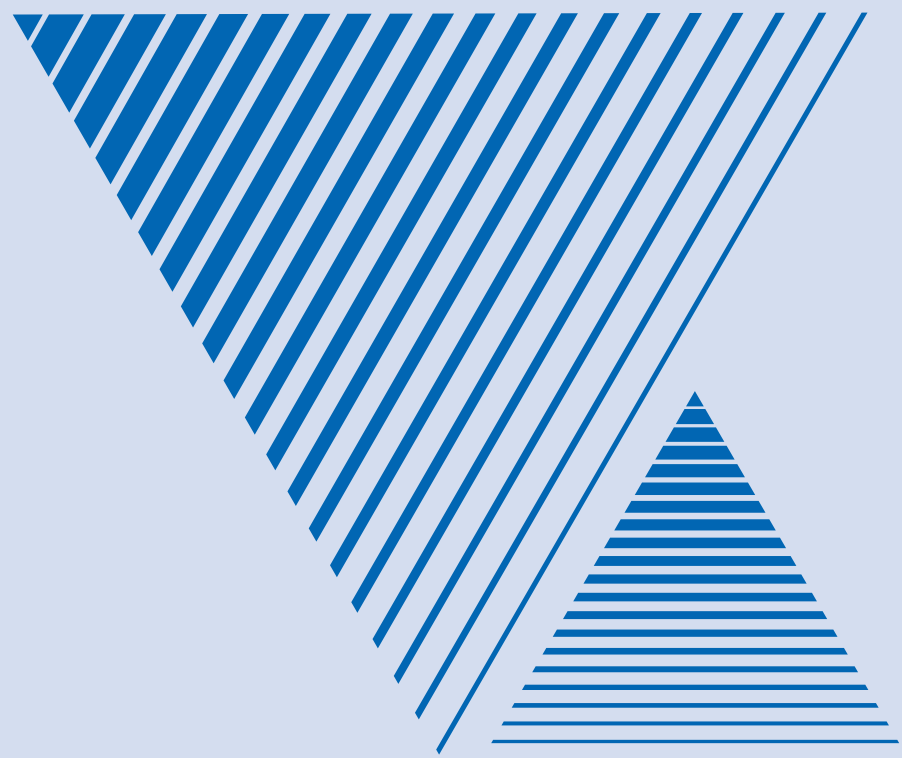


材研報告

No.82 2026



「環境整合材料基盤技術共同研究拠点」としての 材研の取り組み

早稲田大学 各務記念材料技術研究所

所長 菅 原 義 之

各務記念材料技術研究所（以下、材研）は、金属材料からソフトマターに至るまで、幅広い材料分野を研究対象としています。鑄物研究所としてその歩みを始めた材研は、開所50周年という節目を迎えたことを機に現在の名称へと改め、研究領域を拡充してまいりました。

このような歴史的経緯を背景として、材研には、金属材料を中心とする無機材料分野に関する分析装置ならびに加工・評価装置などの研究設備が充実しています。これらの研究設備は、材研構成員の研究活動を支える中核として活用されるとともに、学内外の研究者にも広く利用されてきました。さらに、2018年に「環境整合材料基盤技術共同研究拠点」として認定されたことを契機に、材研は研究設備を、より積極的に社会へと開放する体制を整えてきました。

「環境整合材料基盤技術共同研究拠点」は、文部科学大臣により認定される共同利用・共同研究拠点の一つであり、個々の大学の枠を越えて、全国の研究者の研究活動を支援することを目的としています。その趣旨に基づき、研究設備の利用料金は、学外利用であっても学内利用料金の2倍に抑え、幅広い研究者にとって利用しやすい環境を整えています。また、研究設備の使用によって得られたデータは、論文等を通じて全国の研究者に広く活用されます。こうした情報公開の一環として、本『材研報告』には各共同研究の成果を掲載しています。さらに、材研フェスタや共同研究成果報告会の開催を通じて、学内外の研究者が研究成果を共有し、相互に交流する場を継続的に提供しています。加えて、学内外の若手研究者の育成を目的として、オンライン発表会「ZAIKEN CAFÉ」を開催し、次世代研究者の交流と成長を支援しています。

一方、より多くの研究者の皆様に材研の研究設備の実力を知っていただくことを目的として、研究設備を活用した研究事例について、研究室の学生が紹介する動画の制作を進めています。現在までに8件の研究設備に関する動画を材研公式チャンネルに公開するとともに、材研ホームページの研究設備一覧ページからリンクを掲載し、研究設備の利用を検討される方々が具体的な研究のイメージを持ちやすい環境を整えています。

今後も、「環境整合材料基盤技術共同研究拠点」を基盤として、学外の研究者の皆様に材研の研究設備を積極的にご活用いただき、本拠点が分野や所属を越えて研究者をつなぐ場としての役割を果たしていければと考えております。引き続き、皆様のご支援とご鞭撻を賜りますよう、心よりお願い申し上げます。

目 次

研究題目一覧	1
各研究室の研究成果紹介	11
業績リスト	53
1. 受賞	54
2. 著書・論文	55
3. 講演・発表	66
4. 特許	88
プロジェクト研究（共同研究）	89
共同利用・共同研究拠点	95
「環境整合材料基盤技術共同研究拠点」事業報告	96
「環境整合材料基盤技術共同研究拠点」成果報告	105
事業報告	135

2025年度研究題目一覧

1. 各個研究	2
2. 学外研究費による研究	4
3. 民間企業との共同研究	7

1. 各個研究

荒尾 与史彦 研究員

- 1) グラファイトの液相剥離と電磁波シールドコーティングの応用
- 2) 界面層コントロールによる高剛性GFRPの創出
- 3) 面外熱伝導に優れる接着フィルムの開発
- 4) ナノ素材を利用した高強度・高剛性フィルムの開発
- 5) 熱可塑性エポキシの構造と物性の評価

岩瀬 英治 研究員

- 1) 自己修復型金属配線における気泡発生の抑制方法の検討および評価
- 2) 自己修復型金属配線における修復形態の分類に関する検討
- 3) 折り紙型/切り紙型熱発電デバイスにおける断面熱量変化のシミュレーション
- 4) ポリイミド銅基板を用いたRES構造の垂直圧縮に対する回復性の評価

大久保 將史 研究員

- 1) ナトリウムイオン電池の開発
- 2) 全固体電池の開発
- 3) 水系電池の開発
- 4) レドックスフロー電池の開発

勝藤 拓郎 研究員

- 1) 軌道・スピン・結晶格子の結合に由来する新物性の開拓
- 2) 新奇磁気抵抗物質の開発
- 3) 軌道秩序を示す物質の開発
- 4) モット絶縁体－金属転移の研究
- 5) スローダイナミクスを示す物質の開発とメカニズムの研究
- 6) 光学測定を用いた電子状態の研究

川田 宏之 研究員

- 1) CNT無撓糸を用いた複合材料の創成と分子動力学による強度発現機構
- 2) NOLリング試験によるCNT/CF複合材料の疲労特性
- 3) CNT/CF複合材料の圧縮特性と破壊シミュレーション
- 4) SiC/SiC複合材料の成形と強度特性
- 5) CF/PEEKの熱伝導率の向上に関する研究

小林 正和 研究員

- 1) 低次元系構造の作製と素子応用に関する研究
- 2) テラヘルツ光応用に関する研究
- 3) ワイドギャップ半導体による発光素子開発に関する研究
- 4) テルル系化合物トポロジカル絶縁体材料の薄膜作製
- 5) 近接昇華法によるカルコパイライト材料の開発
- 6) 新規太陽電池用材料の開発

下嶋 敦 研究員

- 1) 有機シラン化合物を用いた光応答性ナノ材料の作製と評価
- 2) 自己修復機能を有する無機ナノ構造材料の設計
- 3) ビルドアップ法による規則性ナノ空間材料の作製と応用
- 4) 層状ケイ酸塩の金属修飾と応用

菅原 義之 研究員

- 1) ヤススナノシート及び二層ナノシートの作製とその応用
- 2) 有機-無機ハイブリッドからの無機多孔質材料の作製とその応用
- 3) 新規窒化物の高圧合成

鈴木 進補 研究員

- 1) 鋼板の塑性変形特性・応力緩和特性に関する研究
- 2) 金属極細管の伸管加工技術の開発
- 3) Ni基超合金スクラップのリサイクル技術開発と高温特性評価
- 4) ポーラス金属の製法開発, 特性評価と応用開発
- 5) 金属用 3D 積層造形に関する研究
- 6) 微小重力環境を用いた金属の凝固挙動の研究
- 7) 液体の熱拡散現象・拡散現象の解明
- 8) 月レゴリスの溶融加工

関根 泰 研究員

- 1) 二酸化炭素高効率転換のための材料開発
- 2) 水素製造の高効率化のための材料開発
- 3) バイオマス転換の高効率化のための材料開発

多辺 由佳 研究員

- 1) コレステリック液晶を使ったマイクロマシーン作製
- 2) 物質透過を制御する単分子膜ポリマー
- 3) 電荷移動二成分混合液晶の誘電特性
- 4) 音波で可視化する液晶薄膜の粘弾性
- 5) カイラル液晶薄膜の気体透過による非平衡ダイナミクス

平田 秋彦 研究員

- 1) 電子回折を用いた非晶質材料の局所構造解析
- 2) メカニカルアロイングによる非平衡材料作製
- 3) 分子動力学法を用いた液体およびガラスの静的および動的構造解析
- 4) 計算ホモロジーを用いた非晶質材料の構造抽出

細井 厚志 研究員

- 1) 金属材料の疲労損傷治癒技術の開発
- 2) 繊維強化複合材料の超長疲労特性評価と寿命評価技術の構築
- 3) 金属表面のナノ空間構造体の創製と異種材料接合技術の開発

柳谷 隆彦 研究員

- 1) 窒化物圧電薄膜の探索とBAWフィルタ応用
- 2) 分極反転強誘電体エピタキシャル薄膜を用いたスイッチナブルフィルタ応用
- 3) 極性反転酸化物圧電薄膜の超音波トランスデューサ応用
- 4) 分極反転構造の圧電トランス薄膜音響共振子の電波発電デバイス応用
- 5) 横波超音波の固有振動数変動による液体中の質量計測センサ応用

山口 勉功 研究員

- 1) 冶金関連物質の状態図と熱力学諸量の測定と集積
- 2) スラグへの有価金属の損失低減
- 3) 自動車用排気ガス浄化触媒からの白金族金属の回収
- 4) 乾式法による希土類磁石含有モータからのレアアースの回収

山本 知之 研究員

- 1) 高輝度・長寿命希土類フリー蛍光体の創製と評価
- 2) 長寿命有機無機ハイブリッドペロブスカイト太陽電池用材料の創製と評価
- 3) マテリアルズインフォマティクスを用いた新構造材料の評価

吉田 誠 研究員

- 1) 鋳型の反力を考慮したFEMによる鋳物の変形予測と構成式の構築
- 2) 鋳物のベアリング欠陥抑制技術の開発
- 3) アルミニウム合金鋳物の凝固割れ発生メカニズムの解明と予測
- 4) 粒子法による流動凝固解析と実験的バリデーション
- 5) 溶融金属の型内フィリング挙動におよぼす排圧の影響の解明と流動凝固予測
- 6) 溶融金属と型の間の熱伝達係数測定および計算技術開発
- 7) アルミニウム合金鋳物の残留応力および変形予測

2. 学外研究費による研究

日本学術振興会科学研究費補助金

<基盤研究S>

- 1) 切り紙構造が誘起する折り紙構造の学理創出とデバイス実証

研究代表者 岩瀬 英治

<基盤研究A>

- 1) 表面プロトニクスを活かした低温でのエネルギーキャリアの合成と利用

研究代表者 関根 泰

<基盤研究B>

- 1) 複雑なナノ界面層が拓く繊維強化複合材料の更なる高強度化

研究代表者 荒尾 与史彦

- 2) 溶融紡績法による高強度CNT紡績糸の創成

研究代表者 川田 宏之

3) ナノビルディングブロックの配列制御に基づく結晶性ポリシロキサン材料の創製

研究代表者 下嶋 敦

<基盤研究C>

1) 液体金属中における拡散係数予測式の構築

研究代表者 鈴木 進補

2) 架橋しない2種混合液晶の動的ネットワーク構造形成

研究代表者 多辺 由佳

3) アップコンバージョン型蛍光体によるペロブスカイト太陽電池の高効率化

研究代表者 山本 知之

<挑戦的研究(萌芽)>

1) メソポーラスシリカナノ粒子を物理架橋点に用いた高強度シリコン材料の創製

研究代表者 下嶋 敦

2) 高密度電流場及び界面性状制御による金属疲労損傷治癒技術の構築

研究代表者 細井 厚志

<学術変革領域研究(A)(計画研究)>

1) イオン渋滞学に基づく新物質創製と機能開拓

研究分担者 大久保 將史

<特別推進研究>

1) 水素の活性化を駆動力とする次世代触媒反応の開発

研究分担者 関根 泰

<国際先導研究>

1) カーボンニュートラルを志向した作動状態解析に基づく固体触媒設計

研究分担者 関根 泰

<国際共同研究加速基金(海外連携研究)>

1) マルチスケール界面性状制御による機能的異種接合技術の開発

研究代表者 細井 厚志

文部科学省

次世代パワーエレクトロニクスに関するデバイス設計と生産技術

研究代表者 吉田 誠

文部科学省 データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト(DxMT)

再生可能エネルギー最大導入に向けた電気化学材料研究拠点

研究分担者 大久保 將史

NEDOグリーンイノベーション基金事業（次世代蓄電池・次世代モーターの開発プロジェクト／蓄電池のリサイクル関連技術開発）

蓄電池のリサイクル関連技術開発

研究代表者 山口 勉功

NEDO先導研究プログラム／未踏チャレンジ

極限環境において高強度・高靱性な異種接合に関する研究開発

研究代表者 細井 厚志

NEDO次世代全固体蓄電池材料の評価・基盤技術開発

次世代全固体蓄電池材料の評価・基盤技術開発

研究分担者 大久保 將史

NEDO水素利用拡大に向けた共通基盤強化のための研究開発事業

燃料電池・水電解の共通基盤技術開発

DXおよびマテリアルズ・インフォマティクスを用いた燃料電池・水電解材料の研究開発

研究分担者 山本 知之

国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）

1) 戦略的創造研究推進事業 総括実施型研究（ERATO）

研究領域：「山内物質空間テクニクス」

研究題目：「無機ナノ物質の次元制御に関する合成と物性評価の研究」

研究担当者 菅原 義之

2) 戦略的国際共同研究プログラム（SICORP）EIG CONCERT-Japan

研究領域：「カーボンニュートラルな都市の実現に向けたソリューション」

研究題目：「持続可能な水質浄化のための光活性な MoO_6 クラスター/半導体ナノコンポジット」

研究担当者 菅原 義之

3) 研究成果最適展開支援プログラム（A-STEP）

研究課題：「6G用圧電単結晶薄膜／多層膜基板構造弾性波デバイス基盤技術の研究開発」

研究代表者 柳谷 隆彦

4) 研究成果最適展開支援プログラム（A-STEP）

研究課題：「次世代デバイス・構造物に向けた高機能性ポリマーとナノ複合材料の開発」

研究分担者 荒尾 与史彦

5) 先端国際共同研究推進事業（ASPIRE）エネルギー分野

研究領域：「カーボンニュートラルの実現に向けたエネルギー研究」

研究課題：「分散型国際ネットワークが実現する基盤蓄電技術革新とネットゼロ社会」

研究代表者 大久保 將史

6) 戦略的創造研究推進事業 (CREST)

研究領域:「未踏探索空間における革新的物質の開発」

研究課題:「水を基軸とする未踏蓄電機能材料の開拓」

研究分担者 大久保 將史

7) 革新的GX技術創出事業 (GteX)

研究領域:「蓄電池領域」

研究課題:「資源制約フリーなナトリウムイオン電池の開発」

研究分担者 大久保 將史

8) 戦略的創造研究推進事業 (ALCA-Next) 先端的カーボンニュートラル技術開発

研究領域:「資源循環領域」

研究開発課題:「ケミカルループ法による革新的CO₂ 転換材料の開発」

研究代表者 関根 泰

エネルギー・金属鉱物資源機構 (JOGMEC)

レアメタル資源の製錬プロセス改善に関する共同研究

研究代表者 山口 勉功

環境省 地域資源循環を通じた脱炭素に向けた革新的触媒技術の開発・実証事業

革新的多元素ナノ合金触媒・反応場活用による省エネ地域資源循環を実現する技術開発

研究代表者 関根 泰

3. 民間企業との共同研究

1) 固液共存領域の合金の力学物性値の取得に関する研究

研究代表者 吉田 誠

2) 合金の凝固収縮挙動に関する研究

研究代表者 吉田 誠

3) 超大型FC/FCD 鋳物の残留応力, 変形の予測制御に関する研究

研究代表者 吉田 誠

4) アルミニウム合金製シリンダヘッドの残留応力予測に関する研究

研究代表者 吉田 誠

5) 鋳鋼品の欠陥発生予測と欠陥発生低減に関する研究

研究代表者 吉田 誠

6) CNT繊維強化プラスチック基複合材料の創成と高強度化

研究代表者 川田 宏之

7) SiC繊維の紡糸方法の開発と成形条件

研究代表者 川田 宏之

8) SiC/SiC 複合材料の力学特性と評価

研究代表者 川田 宏之

- 9) CNT/CF 複合材料の力学特性に関する研究
研究代表者 川田 宏之
- 10) CF/PEEK 複合材料の熱伝導率の測定
研究代表者 川田 宏之
- 11) 溶融加工における粉体レゴリスの気泡発生メカニズム解明
研究代表者 鈴木 進補
- 12) 単結晶ピエゾ膜を使った弾性波共振器に関する研究
研究代表者 柳谷 隆彦
- 13) 圧電薄膜の結晶性および圧電特性制御の研究
研究代表者 柳谷 隆彦
- 14) 5.8GHz帯BAWフィルタの具現化に向けた設計確立
研究代表者 柳谷 隆彦
- 15) アモルファス基板上への高配向圧電膜の成長メカニズムの解析並びに微細構造付き水晶基板の圧電特性の解析及び特性制御
研究代表者 柳谷 隆彦
- 16) 超音波を発する骨接合材設計の研究
研究代表者 柳谷 隆彦
- 17) CFRPの疲労特性評価
研究代表者 細井 厚志
- 18) モータ材料のリサイクル実用化技術開発
研究代表者 山口 勉功
- 19) 金属－スラグ間の微量元素分配挙動に関する研究
研究代表者 山口 勉功
- 20) $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2\text{-CaO-SiO}_2$ 4元系スラグを中心とした基礎的性状の調査及びスラグ組成による白金族金属の分配比の研究
研究代表者 山口 勉功
- 21) リサイクル原料由来金属Cuのマット化に関する研究
研究代表者 山口 勉功
- 22) 廃太陽光パネルからのガラスの分離と金属シリコンと有価金属の分離・回収
研究代表者 山口 勉功
- 23) GHGを極力排出しない銅リサイクルプロセスの創出に関する基礎研究
研究代表者 山口 勉功
- 24) 銅屑リサイクルに向けたSn及びNi系不純物の無害化技術開発
研究代表者 山口 勉功

25) 新規ナノ材料における構造形成過程の解析	研究代表者	下嶋	敦
26) 可溶性無機塞栓物の開発	研究代表者	下嶋	敦
27) ナノマテリアルコート「ハドラス」の新規および改良研究開発に係る実現性検討	研究代表者	下嶋	敦
28) 層状六ニオブ酸塩を用いた機能性材料の作製	研究代表者	菅原	義之
29) エポキシ添加PP複合材料の高機能化	研究代表者	荒尾	与史彦
30) 繊維コーティングによる複合材料の機械的特性の向上	研究代表者	荒尾	与史彦
31) 電極活性に関する研究	研究代表者	大久保	將史
32) ナトリウムイオン電池に関する研究	研究代表者	大久保	將史
33) 量子フーリエ変換・逆変換を利用した固体モデリング触媒表面反応	研究代表者	関根	泰
34) カーボンニュートラルに向けた電場触媒反応場での不活性ガスの水素化	研究代表者	関根	泰
35) In_2O_3 やその他酸化物を含む触媒を用いたエタンの酸化的脱水素反応	研究代表者	関根	泰
36) 電場アシスト法による NO_x 吸蔵および還元触媒の研究開発	研究代表者	関根	泰
37) 低温アンモニアクラッキング技術の研究	研究代表者	関根	泰
38) 低温での亜酸化窒素浄化技術の研究	研究代表者	関根	泰
39) 多様なバイオマスを原料としたLPG直接合成技術	研究代表者	関根	泰
40) 触媒を用いた廃プラスチックの低温ガス化に関する研究	研究代表者	関根	泰
41) 半導体センサ用材料の研究	研究代表者	関根	泰

- | | | | |
|--------------------------------------|-------|----|----|
| 42) 電場印加触媒での担体構造化の研究 | 研究代表者 | 関根 | 泰 |
| 43) カーボンニュートラルに資する技術の研究 | 研究代表者 | 関根 | 泰 |
| 44) CO ₂ 固体炭素化技術の研究 | 研究代表者 | 関根 | 泰 |
| 45) 中低温レドックス能を有する高機能材料の探索 | 研究代表者 | 関根 | 泰 |
| 46) 超高速AI分子シミュレータの評価および触媒反応の機構解明 | 研究代表者 | 関根 | 泰 |
| 47) 酢酸製造の触媒開発, プロセス開発 | 研究代表者 | 関根 | 泰 |
| 48) 電場印加炭化水素改質触媒反応の詳細メカニズム把握手法に関する研究 | 研究代表者 | 関根 | 泰 |
| 49) 複雑系材料開発に向けた量子回路学習予測モデルの構築と適用 | 研究代表者 | 山本 | 知之 |

2025年度各研究室の研究成果紹介

荒尾与史彦	研究員	12
岩瀬 英治	研究員	14
大久保將史	研究員	16
勝藤 拓郎	研究員	18
川田 宏之	研究員	20
小林 正和	研究員	22
下嶋 敦	研究員	24
菅原 義之	研究員	26
鈴木 進補	研究員	28
関根 泰	研究員	32
多辺 由佳	研究員	34
平田 秋彦	研究員	37
細井 厚志	研究員	39
柳谷 隆彦	研究員	41
山口 勉功	研究員	43
山本 知之	研究員	45
吉田 誠	研究員	47

材研研究奨励生

門井 洸衛	48
熊木 拓海	49
鯉川 智生	50
Trakuldit Supicha	51
増田 拓海	52

荒尾与史彦研究室

ガラス繊維へのグラフェンコーティングによる繊維強化プラスチックの強度向上

1. 研究目的

グラファイトや窒化ホウ素などの層状鉱物は、面内の強度は高いものの、層間はファンデルワールス力で弱く結合しているため、外力を付加することで剥離が進んで厚み10 nm以下のナノシートを得ることができる。特に原子1層まで薄層化したグラファイトは「グラフェン」と呼ばれ、通常のグラファイトとは異なる特異な電気的特性を発現することが知られている。

本研究では剥離した数層グラフェンの分散液をコーティング剤として使用し、グラフェンの優れた機械的特性や電気伝導性を活用する。その応用例の一つとして、ガラス繊維へのグラフェンのコーティングを行い、コーティングさせた織物へ樹脂を含浸させることで、グラフェンコーティングガラス繊維からなる繊維強化プラスチックを成形した。得られた積層板の曲げ試験を行うことで、グラフェンコーティングによる強度上昇、およびその強度上昇メカニズムについて調査を行った。

2. 研究成果

2.1 ガラス繊維への数層グラフェンの均一コーティング

黒鉛はそのままでは液体に分散させることはできない。そこで、黒鉛とグルタミン酸カリウムをボールミルにて粉碎させ、その際にメカノケミカル反応により黒鉛エッジ部にグルタミン酸カリウムを吸着させた。これにより、極性溶媒に改質黒鉛を入れると、改質黒鉛のエッジ部のカリウムが乖離し、改質黒鉛は負に帯電することになる。この負の帯電により、静電反発力が生まれ、黒鉛が極性溶媒中で剥離して分散安定する。また、剥離分散させる溶媒の選択も重要であり、黒鉛と表面張力をマッチさせる必要がある。水は表面張力が高すぎであり、アルコールでは表面張力が低すぎるため、水とプロパノールを60:40の体積比率

で混和させることで、黒鉛と表面張力がマッチした溶媒となる。通常、黒鉛をアルコールで超音波分散させても、剥離率は0.1%であるが、改質黒鉛を水/IPA溶液中で超音波分散させることで、剥離率は90%を超え、高濃度の数層グラフェン分散液を調整することに成功した。

この分散液にガラス繊維織物を浸漬させると図1に示すように白色のガラス繊維が灰色～黒色の織物へと変色した。左端はアセトンを分散液をコーティング剤とし、左から2番目以降は水/IPA分散液でコーティングしたものである。また左からグラフェン濃度2 g/L、5 g/L、10 g/Lと濃度の異なるコーティング液に浸漬させてコーティングしたものである。濃度が濃くなるにつれて、ガラス繊維表面が黒色へ変化していることが見てとれる。実際に数層グラフェンのコーティング量も増えていき、最大で重量割合で約0.5%の数層グラフェンがガラス繊維表面へ吸着している。この吸着性は、基材であるガラス繊維により大きく異なる。ガラス繊維が正に帯電する場合、負に帯電している数層グラフェンを引き付け、表面へ均一なコーティングを行うことができる。一方でガラス基材に帯電がない、あるいは負に帯電する場合、数層グラフェンは吸着しないことを確認している。数層グラフェンが吸着したガラス繊維の拡大画像を図2に示す。このように繊維へ均一に吸着しており、繊維表面に凹凸がうまれていることが確認された。

2.2 ガラス繊維強化複合材料の機械的特性の評価

ガラス繊維織物へエポキシ樹脂を含浸させて硬化させることで、ガラス繊維強化プラスチックの板を成形した。この板を短冊状に切り出し、曲げ試験により機械的特性の評価を行った。曲げ試験の中央部表面における試験片の応力-ひずみ線図を図3に示す。ガラス繊維へ数層グラフェンをコーティングしていない試験片(NGFRP、黒色)につ

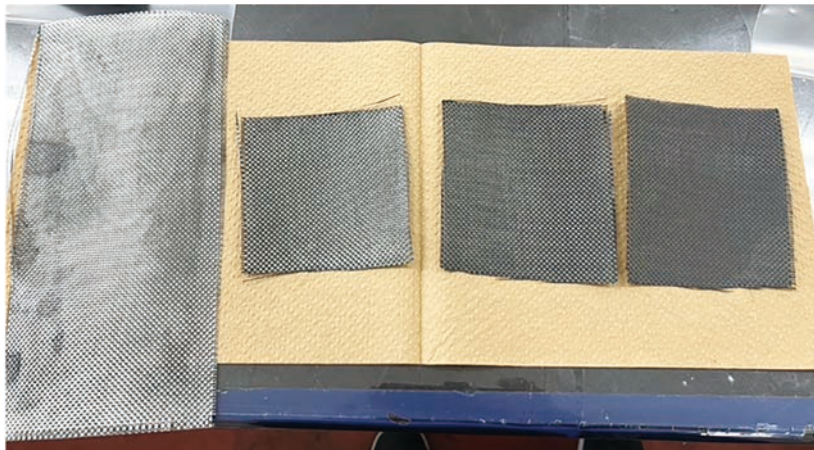


図1 ガラス繊維織物への数層グラフェンコーティングの外観
右に行くほど高い濃度でのグラフェンコーティングとなる。

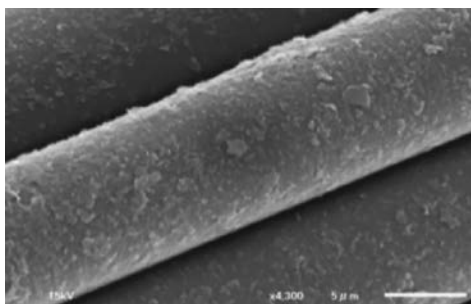


図2 繊維表面への数層グラフェンのコーティング

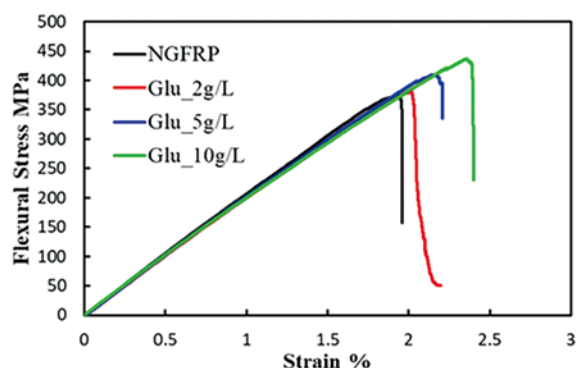


図3 ガラス繊維強化プラスチックの曲げ試験結果

いては、弾性率20 GPa、曲げ強度370 MPaであった。数層グラフェンのコーティング濃度が増加するほどに曲げ試験における破断ひずみ及び破断強度が増加しており、最大で強度440 MPaとなった。約20 %の強度上昇と破断伸びの上昇を得ることができた。

この強度上昇メカニズムを検証するために、破断中の試験片の端部を観察したところ、グラフェンをコーティングしていないものでは、表面から多数の亀裂が発生し、試験片板厚方向へ亀裂が進展していることが分かった。一方でグラフェンでコーティングすることで、亀裂は縦方向ではなく横方向へとそれ、亀裂進展長さや亀裂発生が抑制されることが分かった。これはグラフェンが亀裂進展を抑制していることに起因する。また破断面においても、繊維の表面へ数層グラフェンがしっかりとコーティングされており、繊維とグラフェン間の相互作用が強く、グラフェンコーティングは容易に剥がれ落ちないことを確認した。

3. まとめ

ガラス繊維へ数層グラフェンをコーティングすることで、繊維強化プラスチックの内部での亀裂進展を抑制することができ、それにより破断強度、破断伸びを20 %程向上させることに成功した。またグラフェンコーティングにより、絶縁性のガラスが導電性へと変化する。そのため、電気抵抗を測定することで、ガラス繊維強化プラスチックに負荷されるひずみや、内部亀裂の発生、進展状況を予測することができる。すなわち、ガラス繊維への数層グラフェンのコーティングは、機械的特性向上だけではなく、ひずみモニタリングや損傷センシングなどの機能性を有することを確認している。ガラス繊維表面周りの界面層を自在にコントロールすることで、力学特性及び機能性を発現できる次世代複合材料の開発を行っていく。

(1) 折り紙型/切り紙型熱電発電デバイスにおける断面熱量変化のシミュレーション

本研究の目的は、折り紙型の熱電発電デバイス (Thermoelectric generator, TEG) において、熱電素子内部の熱流束変化をシミュレーションにより解析することである。近年、折り紙型/切り紙型 TEG を平面状から立体状に変形させた際に、熱電素子に大きな温度差が生じ、大きな出力電圧が得られることが報告されている。志々田らは有限要素法 (Finite Element Method, FEM) を用いて折り紙型 TEG における伝熱挙動を解析し、周囲空気との熱交換を考慮することで、立ち上げ変形に応じた熱電素子に生じる温度差を再現した。先行研究では、熱電素子に生じる温度差には、TEG 脚部と周囲空気間での放熱が影響していることが示唆されているが、定量的な議論はなされていない。そこで本研究では、断熱条件の有無を比較することで、熱電素子から周囲空気へ放熱する熱量の影響を解明する。

本研究で用いた折り紙型 TEG のシミュレーションモデルについて、図 1、図 2 に示す。TEG の折り上げ角は $\theta = 60^\circ$ でシミュレーションを行った。熱源であるホットブ

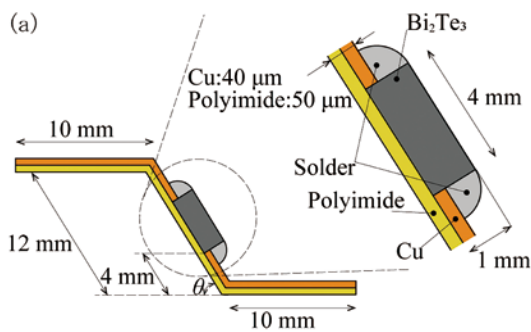


図 1 折り紙型熱電発電デバイスの概略図

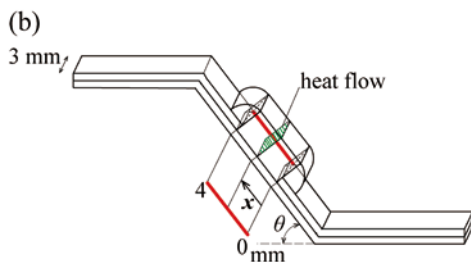


図 2 距離 x と起き上げ角度 θ の定義

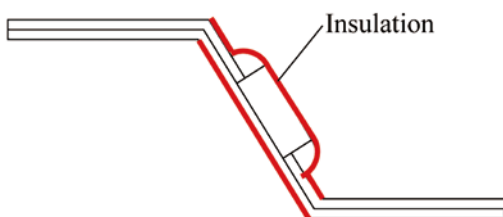


図 3 断熱条件を適用した境界

レートは一辺 90 mm の正方形とし、温度を 373.15 K に設定した。空気については、ホットプレート上方に一辺 120 mm の正方形、高さ 60 mm の領域とし、重力を考慮した自然対流をモデル化し、初期圧力を 1 atm とした。本研究では、図 2 の赤線上の温度分布を計測し、断面熱量を算出した。赤線は熱電素子部の中心を通る線である。熱電素子部下端を原点とし、脚部に沿って座標系を設定した。また断熱条件については、図 3 の赤線で示す空気接触部分へ適用した。

図 4 に断熱および断熱なし条件での熱電素子内部の温度を示す。このシミュレーションで得られた温度を基に熱量を計算したものを図 5 に示す。熱電素子下端からの距離 x [mm] での温度 $T(x)$ [K] から熱量 $Q(x)$ [W] は、 $Q = kA(\Delta T/\Delta x)$ の関係式から算出した。ここで、 k は熱伝導率であり、熱電素子部では $1.6 \text{ W/m}\cdot\text{K}$ を用いた。また、 A は断面積であり、熱電素子部での面積は $3.0 \times 10^{-6} \text{ m}^2$ である。図 5 において、断熱条件なしでの熱電素子内部の断面熱量は、熱電素子下端 ($x = 0 \text{ mm}$) では、60.85 mW であり、熱電素子上端 ($x = 4 \text{ mm}$) では、40.35 mW であるように、熱電素子下端から上端に向かうにつれて断面熱量が減少した。一方で断熱条件では、熱電素子下端 ($x = 0 \text{ mm}$) で、40.26 mW であり、熱電素子上端 ($x = 4 \text{ mm}$) で、41.79 mW であり、熱電素子内部での断面熱量の変化はわずかであった。この結果から、断熱なしの場合は断熱ありの場合に比べ、熱電素子内部を通過する熱量がほぼすべての位置で大きく

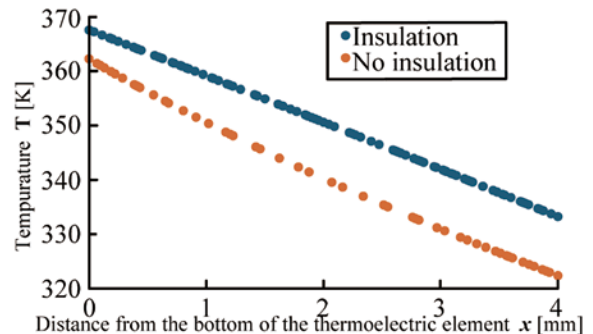


図 4 熱電素子底部からの距離と温度の関係

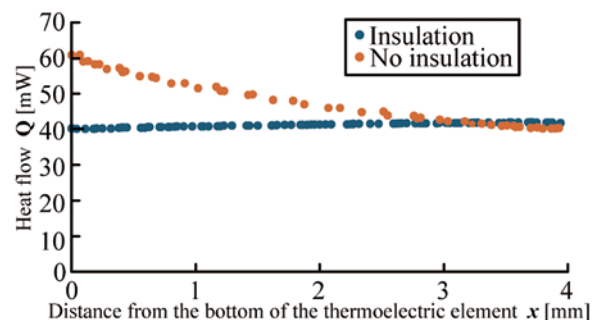


図 5 熱電素子底部からの距離と熱流の関係

なっていることがわかる。これは、熱電素子部での放熱によって、熱電素子内部の熱量が増えていることを示している。

(2) ポリイミド銅基板を用いたRES構造の垂直圧縮に対する回復性の評価

本研究の目的は、図6に示すような回転によって平面から立体化する切り紙構造であるrotational erection system (RES) 構造に関して、電子デバイスで利用可能なポリイミド銅基板を用いた際の垂直圧縮に対する回復性を評価することである。熱電発電において、切り紙型熱電発電デバイスは平面から垂直方向に立ち上げることで熱電素子により温度差が付き大きな電力を取り出せるため研究が行われている。切り紙構造は平面から立体化することが可能であるが、従来の切り紙型熱電発電デバイスに用いられている切り紙構造は、外力を除荷すると平面に戻ってしまう。一方で、RES構造は、以下の2つの性質があることが報告されている。1つ目は、双安定構造であるため外力を除荷しても立体形状を保つ性質であり、2つ目は、図6に示すように立体化したRES構造に垂直荷重をかけた際に平面化とは別の方向に変形するため、垂直荷重をかけても元の立体形状に戻りやすい性質である。2つ目の性質は、例えば動物や人に踏まれても形状回復することが示唆される。すなわち、上記2つの性質は共に切り紙型熱電発電デバイスに適した性質であるため、本研究では切り紙型熱電発電

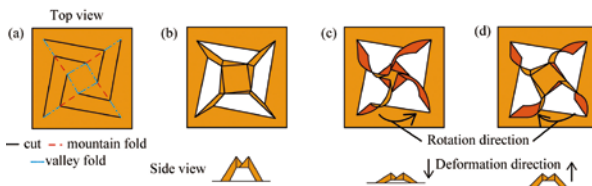


図6 RES構造の変形過程

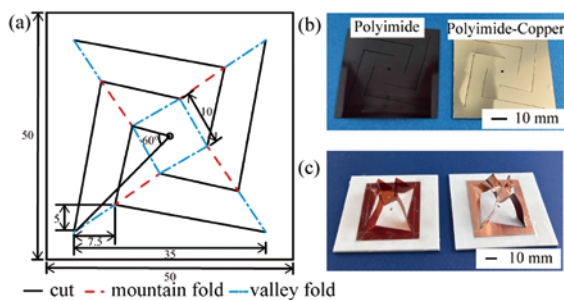


図7 熱電素子底部からの距離と熱流の関係

デバイス作製時に使用するポリイミド銅基板を対象として評価を行った。

図7に本研究で適用したカットパターン(図7(a))と製作した試験片(図7(b), (c))を示す。試験片は、基板のサイズを50 mm×50 mmとし、厚み150 μm のポリイミド基板および厚み10 μm の銅基板を用いた。ポリイミド基板と銅基板は20 μm の両面粘着テープを用いて接着し、UVレーザーで加工した後、平面から立体化させた。試験片を逆さの状態で治具に固定し、ナイロン糸を用いて垂直上方向に引っ張った。試験片が潰れ、試験片上部が治具まで到達したら、変位を下げ、垂直荷重を除荷をする。この一連のプロセスにおける荷重-変位線図を測定した。

図8と9に各試験片の荷重-変位線図を示す。ポリイミド基板単体、ポリイミド銅基板の試験片ともに約16 mmの高さであり、ポリイミド基板単体の試験片の除荷後の残留変位は約1.6 mmなのに対し、ポリイミド銅基板の試験片の残留変位は2.1 mmであった。この結果は垂直荷重で押しつぶされた際に基板の一部が塑性変形した影響によると考えられる。

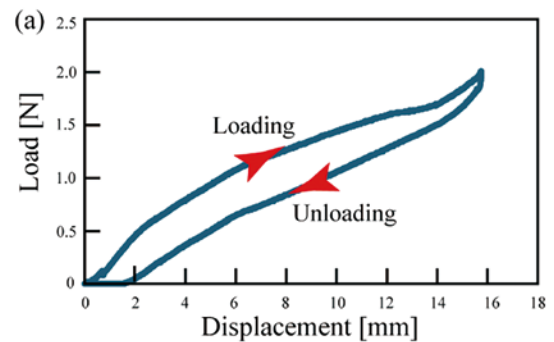


図8 垂直方向変位に対する荷重特性(ポリイミドシートを材料とした場合)

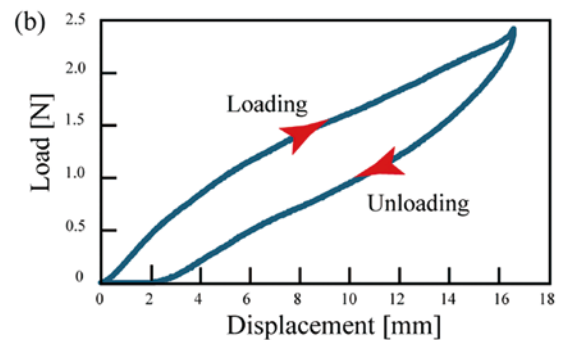


図9 垂直方向変位に対する荷重特性(ポリイミド銅シートを材料とした場合)

1. 研究背景

再生可能エネルギーを系統へ大量導入するには、出力平準化のため大規模貯蔵システムが不可欠であり、長寿命かつ資源制約フリーな蓄電池が好ましい。商用化されているバナジウム系レドックスフロー電池はその有力候補のひとつであるが、資源制約性が高く価格の急激な高騰も起きるバナジウムの使用が普及を妨げている。そこで近年、資源制約フリーな有機活物質を用いたレドックスフロー電池の開発が盛んになってきている。その中でも、アントラキノン系化合物はバイオマス資源であり2電子反応が可能のため、負極液として有望である¹。しかし、バナジウムを代替するには至っておらずサイクル特性やエネルギー密度(溶解度に比例)のさらなる向上が求められている。

様々なアントラキノン系負極液が開発されてきているが、本研究では高いサイクル安定性と溶解度を示す2,2'-(9,10-anthraquinone-2,6-diylldioxy)dipropanoic acid (1Me)に着目した²。充放電サイクルにおける容量劣化機構の一つは、溶液中のOH⁻などによるエーテル部位への求核攻撃を起点とする分解反応と考えられている。そこで、エーテル結合周りの分枝側鎖を伸ばし、立体的保護効果によるサイクル安定性の向上を目指した。具体的には、分枝をエチル基に伸ばした2,2'-(9,10-anthraquinone-2,6-diylldioxy)dibutylic acid (1Et) とプロピル基まで伸ばした2,2'-(9,10-anthraquinone-2,6-diylldioxy)dipentanoic acid (1Pr) を新規に合成し、既報の1Meと比較して溶解度や各種電気化学特性、充放電性能に分枝側鎖が与える影響を調べた。

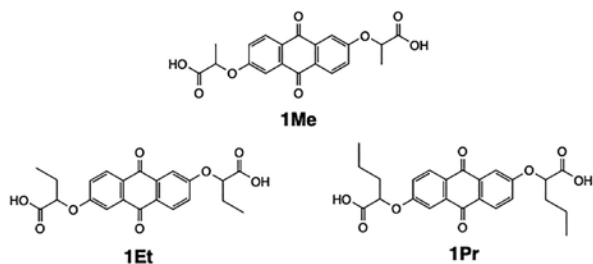


図1. 1Me, 1Et, 1Prの構造式。

2. 実験方法

目的とする1Et, 1Prは既報の1Meの合成²を参考に、2,6-ジヒドロキシアントラキノンと該当する側鎖原料のプロモ体を反応させ、続くけん化反応によって合成した。目的物は、核磁気共鳴測定および高分解能質量分析により同定した。

合成した化合物のサイクリックボルタンメトリー (CV) 測定から酸化還元電位を求め、回転ディスク電極 (RDE) 測定より拡散係数と電極反応速度定数を求めた。水への溶解度は、紫外可視吸収分光法 (UV-Vis) を用いて既知濃度溶液の検量線から求めた。溶媒和エネルギーの見積りは Gaussian16 による DFT 計算 (ωB97X-D/def2-SVPD, SMD

モデル)で行った。

活物質のサイクル安定性を調べるため 1 M KCl, 0.01 M KOH, 活物質 5 mM を混合して電解液を作製し H 型セルを用いて充放電測定を行った。定電流 0.8 mA (=1C レート), カットオフ電位 $-0.4\text{ V} \sim -0.9\text{ V}$ vs Ag/AgCl として 140 サイクル充放電を行った。また、フローセルによる充放電試験は 1Me または 1Et を 0.1 M の負極液として容量制限の条件で行い、正極液には 0.2 M フェロシアン化カリウム水溶液を用いた。浸透圧差のバランスを取るため、負極液にも 0.15 M フェロシアン化カリウムを添加した。

3. 結果と考察

溶解度測定の結果、既報の 1Me (1.54 M) と比較して、1Et (1.73 M) は疎水的な分枝アルキル鎖が長いにもかかわらず、より高い溶解度を示すことが分かった。一方で、さらにアルキル鎖を伸ばした 1Pr では溶解度は減少に転じた。溶解度は、結晶状態と溶液状態のギブズエネルギー差 ($\Delta G_{\text{溶解}}$) に相関しているため、1Et が最も大きな溶解ギブズエネルギー差をとると考えられる (図2)。

そこで、DSC 測定とオクタノール/水分配係数 (P) を求めて結晶状態および溶液状態の安定性を調べた。1Et は低い融点を示すことから、確かに分枝置換基の効果で結晶状態が不安定化したことが分かる。一方で、 $\log P$ 値は相対的に大きく、より疎水性を示すことが分かった。つまり、1Et では結晶状態が大きく不安定化することが主要因で、 $\Delta G_{\text{溶解}}$ の絶対値が増大し高い溶解度を示したと考えられる。DFT 計算による溶媒和エネルギーの見積りからも、この結果を支持する。

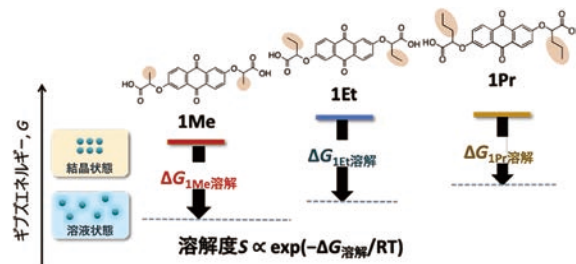


図2. 水への溶解に対するギブズエネルギー図。

各活物質の CV 測定を行った結果、1Et, 1Pr はいずれも -0.66 V (vs Ag/AgCl) の酸化還元電位を示し、既報の 1Me と同等の値を示した。酸化還元中心であるアントラキノン骨格には、側鎖の分枝アルキル基の長さは影響を与えないことが分かった。

次に RDE 測定を行い、Levich プロットから拡散係数 D を、さらに Koutecky-Levich プロットと Tafel プロットから反応速度定数 k^0 を求めた (表1)。拡散係数は、いずれのアントラキノン化合物も同程度 ($3.2 \sim 3.9 \times 10^{-6}\text{ cm}^2\text{ s}^{-1}$) の大きさであり、側鎖長を変えても全体の分子サイズにあ

表1 拡散係数および電極反応速度定数の比較

化合物	拡散係数 $D/\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$	電極反応速度定数 $k^0/\text{cm s}^{-1}$
1Me	3.83×10^{-6}	5.44×10^{-3}
1Et	3.20×10^{-6}	5.14×10^{-3}
1Pr	3.87×10^{-6}	2.75×10^{-3}

まり変化がないことを示唆している。一方、電極反応速度定数 k^0 は分枝鎖が伸びると小さくなる傾向を示した。長いアルキル基を持つ分子ほど酸化還元反応を受ける電極との実効的な距離が離れ、マーカス理論における電子移動の透過係数が小さくなるためだと解釈できる。

続いて、H型セルを用いて予備的に負極液の充放電測定を行った。新規の1Etおよび1Prは、容量減少率が0.45% day⁻¹および0.51% day⁻¹となり、既報の1Me (0.75% day⁻¹)と比較してサイクル安定性が向上した。これは、当初の狙い通り分枝側鎖をより嵩高くしたことで、容量劣化の要因となるエーテル結合した側鎖の分解が抑えられたためだと考えられる。

続いて、正極液をフェロシアン化カリウムとした実際のフローセルを構築して充放電試験を行った(図3)。比較の1Meでは2.8% day⁻¹の容量減少率であったのに対して、1Etでは1.8% day⁻¹と改善した。H型セルによる結果とも一致し、嵩高い分枝アルキル鎖の立体保護効果によって活物質の分解が抑制された結果であると考えられる。

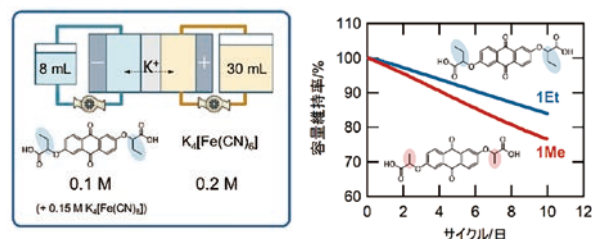


図3. 1Meおよび1Etのフローセル充放電試験に対するサイクル特性の比較。

4. まとめと展望

本研究では、水系レドックスフロー電池用負極活物質として有望なアントラキノ誘導体に着目し、溶解度とサイクル安定性を両立する分子設計指針の構築を目指した。分枝側鎖を適度に長くすることで溶解度とサイクル安定性が両立する系を見出した。アントラキノ系活物質に限らず、高耐久性活物質の分子設計として応用可能であると考えられる。

参考文献

1. Lin, K.; Chen, Q.; Gerhardt, M. R.; Tong, L.; Kim, S. B.; Eisenach, L.; Valle, A. W.; Hardee, D.; Gordon, R. G.; Aziz, M. J.; Marshak, M. P. *Science* **2015**, *349*, 1529-1532.
2. Kerr, E. F.; Tang, Z.; George, T. Y.; Jin, S.; Fell, E. M.; Amini, K.; Jing, Y.; Wu, M.; Gordon, R. G.; Aziz, M. J. *ACS Energy Lett.* **2023**, *8*, 600-607.

勝藤拓郎研究室

1. はじめに

我々のグループは、遷移金属酸化物を中心とした「強相関材料」と呼ばれる物質群を研究対象としている。この物質群は、遷移金属の d 電子間のクーロン相互作用が強く金属と絶縁体の境に位置すること、さらに d 電子のスピンや軌道の自由度が結合することにより、外場、例えば磁場や光に対する特異な応答がしばしば観測される。このような現象は様々なデバイス、特に1つの素子に複数の機能を持つようなマルチファンクショナルなデバイスの創成に有用である。

材研においては、こうした強相関材料に関して、光学的手法を始めとする様々な手法を用いて研究を行っている。2025年度に得られた成果の中から、3つを紹介する。

2. $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x\text{V}_2\text{O}_4$ におけるヤーン・テラー効果とスピン軌道結合

遷移金属の縮退した d 軌道に由来する軌道自由度は多様な物性を生み出し、スピン自由度との結合によってさらに多彩な現象を引き起こす。スピネル型バナジウム酸化物 AV_2O_4 では、 V^{3+} ($3d^2$) の t_{2g} 軌道に軌道自由度があり、 $\text{A} = \text{Zn, Mn, Fe}$ の場合には軌道秩序とともに正方晶歪みが現れる。特に FeV_2O_4 では、 V の軌道秩序とフェリ磁性に加え、 A サイトの Fe^{2+} ($3d^6$) が e_g 軌道の縮退に由来するヤーン・テラー歪みを起こし、温度低下に伴い立方晶から正方晶、斜方晶、再び正方晶へと逐次的な構造相転移を示す。一方、 CoV_2O_4 では V の電子が遍歴的であるため軌道秩序は現れず、代わりに磁歪が支配的で、その歪みの大きさは FeV_2O_4 より小さい。

本研究では、 $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x\text{V}_2\text{O}_4$ 系の詳細な歪測定と磁化測定

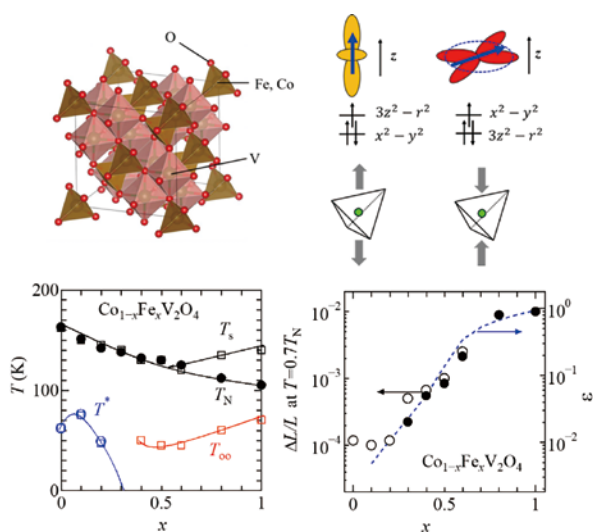


図1 左上: $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x\text{V}_2\text{O}_4$ の結晶構造 右上: スピネル構造 A サイトの Fe^{2+} ($3d^6$) の電子状態とヤーン・テラー歪
左下: $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x\text{V}_2\text{O}_4$ の相図 右下: $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x\text{V}_2\text{O}_4$ における正方晶歪の大きさ (丸は実験値, 点線は計算値)

により、その相図を再構築した。その結果、 Co 側の小さな磁歪状態と Fe 側のヤーン・テラー歪みによる構造相転移が、組成 x の変化に伴い連続的につながることを明らかにした。相図上の広い範囲で、構造転移温度 T_S とフェリ磁性転移温度 T_N が一致する一方、歪みの大きさは x に応じて2桁変化することが分かった。

この実験結果は、 Fe^{2+} の e_g 軌道におけるヤーン・テラー効果とスピンの向きがスピン軌道相互作用を通じて結合するモデルに基づくランダウ理論の計算により、よく再現することができる。このことは、本系ではヤーン・テラー効果とスピン軌道相互作用の組み合わせに由来する、新しいタイプのスピン・軌道・格子の相関が実現していることを示すものである。

3. 軌道-スピン結合系 $\text{Co}_{1-x}\text{Mn}_x\text{V}_2\text{O}_4$ における相の関係

固体物理学においては、組成を変えた混晶系の研究により、相境界近傍で異なる相同士がどのようにつながるかを調べることによって、相の本質を理解することができる。上記のように $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x\text{V}_2\text{O}_4$ 系においては、 Co 側の小さな磁歪状態と Fe 側の構造相転移が、組成 x の変化に伴い連続的につながり、ヤーン・テラー効果とスピン軌道結合の組み合わせによる新しい振舞が示唆された。

MnV_2O_4 においては、 Mn^{2+} ($3d^5$) は軌道自由度を持たないが、 V^{3+} ($3d^2$) の軌道秩序による正方晶への構造相転移と磁気秩序が同時に発現することが知られている。そこで、 $\text{Co}_{1-x}\text{Mn}_x\text{V}_2\text{O}_4$ 単結晶を作製して、歪ゲージによる高感度歪測定と磁化測定を行い、 Co 側の小さな磁歪状態と Mn 側の V の軌道秩序がどのようにつながるかを調べた。得られた相図から、 MnV_2O_4 では磁気転移温度と構造転移温度が一致するが、 Co をドーピングすると両者が分離することが分かった。また、ネール温度以下の歪は比較的小さいのに対し、低温の構造転移に伴う歪はそれより1桁大きい。ランダウ理論による解析では、磁化と軌道自由度の双二次結合によりこれらの振舞いが再現され、小さな歪みは磁気秩序に起因し、大きな歪みは軌道秩序に由来することが示唆された。 $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x\text{V}_2\text{O}_4$ 系では Fe のヤーン・テラー効果が主要因であるが、 $\text{Co}_{1-x}\text{Mn}_x\text{V}_2\text{O}_4$ 系では V 軌道間のクーゲル・コムスキー型相互作用が原因であり、構造歪みの起源が本質的に異なることが明らかとなった。

さらに、温度によって正方晶歪の符号が変化する温度が磁化のピーク温度と一致することが明らかとなった。この挙動は $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x\text{V}_2\text{O}_4$ 系でも観測されたものであり、磁場中で結晶ドメインと磁区が整列する際、完全に立方対称に近い状態で磁区の運動が最も容易になることにより説明される。

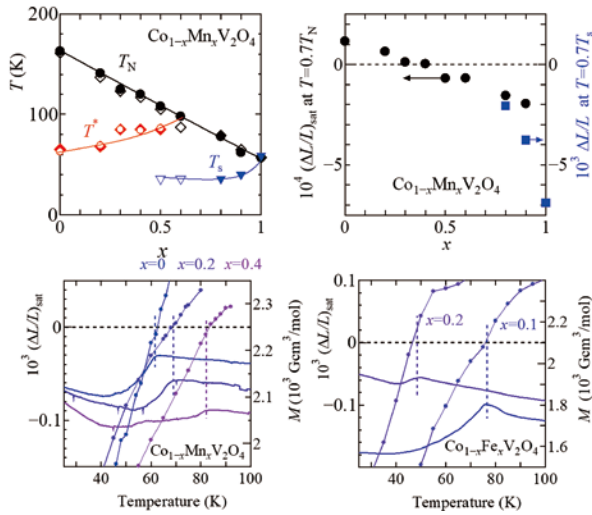


図2 左上: $\text{Co}_{1-x}\text{Mn}_x\text{V}_2\text{O}_4$ の相図 右上: $\text{Co}_{1-x}\text{Mn}_x\text{V}_2\text{O}_4$ における正方晶歪の大きさ。丸はネール温度以下での歪 (左軸), 四角は構造相転移温度以下での歪 (右軸) 左下: $\text{Co}_{1-x}\text{Mn}_x\text{V}_2\text{O}_4$ における磁化のピーク (実線, 右軸) と正方晶歪 (丸と線, 左軸) 右下: $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x\text{V}_2\text{O}_4$ における磁化のピーク (実線, 右軸) と正方晶歪 (丸と線, 左軸)

4. $\text{BaV}_{10-x}\text{Ti}_x\text{O}_{15}$ の二相共存状態における磁性

有機物や遷移金属化合物では、電荷秩序や軌道秩序に伴う相転移において、過冷却状態からの遅いダイナミクスが観測されることがある。このような遅いダイナミクスの起源としては、核生成・成長過程やガラス的挙動が提案されているが、どの長さスケールの不均一性が遅いダイナミクスを支配しているかを実験的に示すことは難しいことが知られている。

本研究では、 $\text{BaV}_{10-x}\text{Ti}_x\text{O}_{15}$ ($x=0.15$) における軌道無秩序相 (OD) と軌道秩序相 (OO) の二相共存状態のスローダイナミクスに着目した。この系では、スローダイナミクス下で温度と待機時間を制御することで両相の体積比を変化させることができる。さらに、OO相とOD相ではネール温度がそれぞれ25 Kと15 Kで異なるため、磁化率測定により各相の寄与を区別できるという特徴を利用した。

測定の結果、二相共存状態では磁化率に二つのピークが現れ、OO相の体積分率が減少するにつれて、そのネール温度が低温側へシフトすることが分かった。一方、OD相のネール温度はほとんどシフトしないことが分かった。この結果は、OO相がナノメートルサイズのクラスターとして存在し、そのサイズが小さくなることで磁気秩序が抑制されることを示唆する。また、このサイズは核生成・成長理論から見積もられる臨界核サイズとも整合的である。一方、OD相は結晶全体に連結して存在するため、体積分率が小さくなくても長距離秩序が維持され、ネール温度のシフトが起こらないと考えられる。

以上より、本研究は磁化率測定を用いて二相共存状態の特徴的な長さスケールを評価する手法を提案し、 $\text{BaV}_{10-x}\text{Ti}_x\text{O}_{15}$ における遅いダイナミクスがナノスケールの核生成・成長過程に支配されていることを明らかにした。

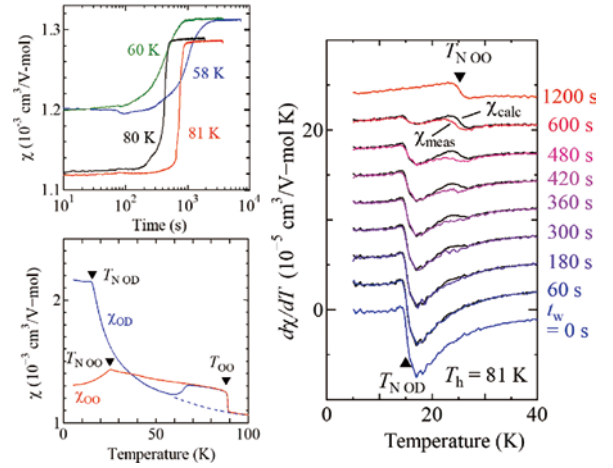


図3 左上: $\text{BaV}_{10-x}\text{Ti}_x\text{O}_{15}$ ($x=0.15$) の磁化率の時間依存性。左下: 急冷した場合 (軌道無秩序相, 青色) と徐冷した場合 (軌道秩序相, 赤色) の昇温過程での磁化率の温度依存性 右: 81 K で様々な待機時間 t_w で止めた後に急冷後に昇温で測定した磁化率の温度微分 (χ_{meas} , 赤～青色) と、軌道秩序相と軌道無秩序相の磁化率の温度微分を両相の体積比で足したもの (χ_{calc} , 黒色) の比較。15 K のステップが軌道無秩序相のネール温度, 25 K のステップが軌道秩序相のネール温度。

川田宏之研究室

1) 溶液紡糸法による高強度CNT系の創製

カーボンナノチューブ (CNT) とは並外れた比強度・比剛性を持つナノ材料であり、航空宇宙分野への応用が期待されている。マクロスケールでの応用には集合体のCNT系が用いられるが、従来の乾式紡糸法で作製されたCNT系は、作製方法の制約から結晶性の低いCNT単体を用いざるを得ず、かつ繊維内部に多数の空隙が残ってしまう点から、超高強度繊維を達成するには不向きである。近年、クロロスルホン酸 (CSA) を分散媒として用いた溶液紡糸法に注目が集められている。この方法では、結晶性の高いCNT単体を用いることが可能であり、かつ高配向・緻密構造を持つCNT系の作製が可能である。したがって、本研究ではCSAベースの溶液紡糸プロセスにおけるCNT系の高強度化に向けた最適化指針を明らかにすることを目指した。はじめに、合成条件およびアスペクト比が異なる複数種の原料CNTについてCSA中での分散挙動を調査した。高い結晶性を持つCNTではネマティック液晶相の形成が確認されたものの、炭素不純物の残留量が多数確認された原料では、安定した連続紡糸を実現できず、炭素不純物の影響であると示唆された。このことは液晶ドーブの形成に加えて原料純度の確保が紡糸プロセスの安定性を支配する因子であることを示唆する。続いて、吐出流量と延伸比を段階的に変化させたところ、流量が大きい条件ではCNTの配向度が低下し、逆に流量が小さい条件では凝固溶液が紡糸ノズル側へ逆流して成形が不安定化した。このことから、両パラメーターにはそれぞれ最適範囲が存在すると考えられる。ドーブ濃度についても検討を行い、1 vol%の条件において配向係数0.93、引張強度 1.9 ± 0.15 GPa、弾性率 199 ± 19 GPaという力学特性を持つCNT系が得られた。作製したCNT系の断面微細構造を評価したところ、CNTが高度に配向し緻密に充填された低空隙組織が確認された一方で、スルホン化に由来する残留物が繊維内部に点在しており、これが繊維の構造欠陥として作用している可能性が示唆された。そこで、CSA中での軽微な追延伸とN-メチル-2-ピロリドン (NMP) による洗浄を組み合わせた後処理を施した。その結果、残留スルホン化物が効果的に除去されるとともに断面形状が均質化し、引張強度 2.3 ± 0.2 GPa、弾性率 232 ± 38 GPaへと特性が向上した。今後は、液晶流動の理論モデルに基づく成形条件の最適化、高アスペクト比CNTへの展開、ならびにドーブ調製段階での複合化による界面制御を通じて、一層の高強度化を推進する。

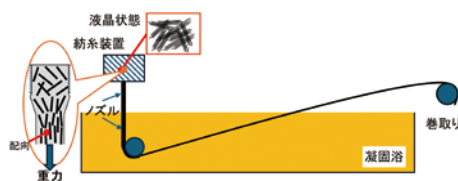
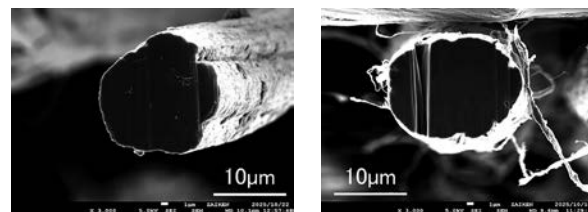


図1-1 溶液紡糸の概要図



(a) 後処理前 (b) 後処理後

図1-2 CNT系断面のSEM像

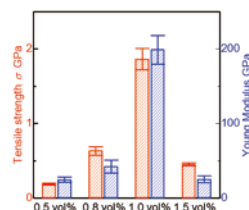


図1-3 ドープ濃度とCNT系の力学特性の関係

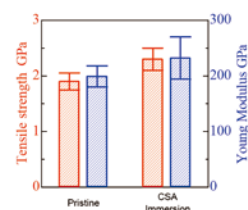


図1-4 後処理の有無による力学特性の比較

2) 蒸気タービン用スラスト軸受摺動材としてのCF/PEEK複合材料の熱伝導率向上に向けた研究

近年の世界での目覚ましい経済発展と人口増加に伴い、世界の電力需要は大きく拡大を続けている。カーボンニュートラルに向けた動きの中で、風力発電、太陽光発電等の再生可能エネルギーの導入が拡大している一方、火力発電や原子力発電等の主要機器である蒸気タービンの高効率化も依然として求められる。高効率化への取り組みとして、炭素繊維強化PEEKを用いた蒸気タービン用スラスト軸受が開発されている。これは従来のホワイトメタル製のものと比較し摩擦係数、比摩耗量、耐熱温度等に優れ、タービンの高効率化に寄与している一方で、熱伝導率が低く、温度監視の点で問題が生じている。温度監視を適切に行うためには、面外方向熱伝導率10 W/mK程度が求められる。従来の研究から、CFRPでは樹脂の熱伝導率がボトルネックとなっており、繊維を改善するだけでは目標値である10 W/mKに達しないことが明らかとなっている。そこで本研究では、特に樹脂の熱伝導率改善を通じて炭素繊維強化PEEKの面外方向熱伝導率を向上させることを目的として、実験および有限要素法による解析を行った。

実験ではエポキシ樹脂中にポリドーパミン (PDA) 修飾をしたグラフェンナノプレートレット (GNP) を混合した複合材料を作成し、GNPの樹脂熱伝導率向上への効果、PDA修飾の有無による差を調査した。結果として、PDA修飾をしていないGNP/Epoxyの場合、GNP 3 wt%で0.40 W/mK、5 wt%で0.60 W/mKであったのに対し、PDA修飾をしたGNP@PDA/Epoxyでは3 wt%で0.38 W/mK、5 wt%で0.36 W/mKと、PDA修飾による熱伝導率向上の効果は認められず、逆に低下させる要因となってしまった。これはエポキシ樹脂中に存在するヒドロキシ基の数が少なく、水素結合によるエポキシ-GNP間の接着の改善がなされず、逆に

PDA層が熱抵抗として働いたためと考えられる。

解析では、CFRP積層板の断面画像から繊維配置を正確にトレースしたモデルを作成し、実験結果と整合する形で繊維直交方向の熱伝導率を算出した。その結果PAN系炭素繊維では軸方向の1/3～1/4程度、Pitch系炭素繊維では軸方向の1/8～1/10程度であることが確認された。その結果を用いて、10 W/mK到達に要求される樹脂の熱伝導率の算出を行った。また、GNP/CF/PEEKモデルを作成し、GNP添加による熱伝導率の限定的な向上を確認した。

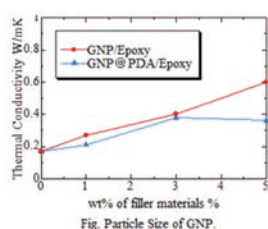
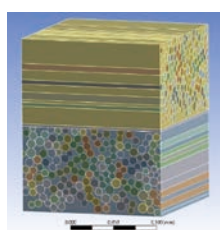
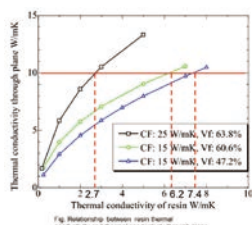


図 2-1 GNP@PDA/Epoxyの熱伝導率

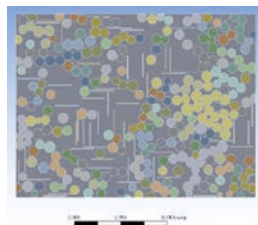


(a) CF/PEEKの解析モデル

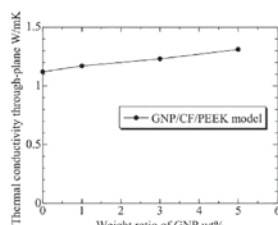


(b) CF/PEEKモデルの熱伝導率

図 2-2 CF/PEEKモデル



(a) CF/GNP/PEEKの解析モデル



(b) CF/GNP/PEEKモデルの熱伝導率

図 2-3 CF/GNP/PEEKモデル

3) アーク風洞試験によるコスモコートFB-SiC/SiC複合

材料の耐熱性・耐酸化性評価

SiC/SiC複合材料は軽量で耐熱性に優れ、航空宇宙・エネルギー分野などの高温環境下で利用拡大が期待されている。しかし、従来のマトリックス形成法は長時間処理を要し、製造コストが高くなっている。さらに、高温酸化環境下では界面層とマトリックスの酸化劣化により、機械的特性が大幅に低下することが報告されている。これらの課題に対し、本研究室では膜沸騰法（FB法）を用いたマトリックスの高速緻密形成と、多元素金属酸化物からなるコスモコートによる高温酸化耐性の向上を図った。本研究の目的は、FB法により作製したSiC/SiC複合材料に対しコスモコートを適用し、実使用環境（再使用型宇宙往還機の再突入）を模擬したアーク風洞試験における高温酸化挙動、及び機械的特性と微細構造の変化を明らか

にすることである。さらに、付加コート材の影響を比較してコーティング作製条件と高温酸化耐性の関係を整理し、最適なコーティング条件の設計指針を得ることを目的とする。アーク風洞試験前後の4点曲げ試験結果について、曝露前のS/FBと比較して、コスモコートを施したC-A2、およびDurazaneを付加したCD-A1は僅かに強度低下し、ZrO₂を付加したCZ-A2は有意な強度低下が得られた。一方、コスモコート処理を行っていないN-A2の強度は低下しなかった（図3-1a）。参考として、昨年度実施された1300℃・10時間曝露では、コスモコート処理を行っていない供試体の機械的特性が著しく低下することが報告されている（図3-1b）。TEM・EDSの結果、N-A2の表面にはSiO₂などの酸化物の形成が確認されたが、断面部においては酸化されていない。これは、表面に形成された酸化物が保護膜となり内部への酸素侵入を防ぎ、界面層の酸化が抑えられたことを示している（図3-2a、図3-2b）。一方、C-A2は表面から約300 μmまでの酸化が確認され、コスモコート中の金属酸化物が酸化反応を促進した可能性や、焼成によって炭素界面層が消失して酸化パスが形成したことが示唆された（図3-3a、図3-3b）。CD-A1は酸化があまり進行しておらず、Durazaneがガスバリアした可能性を示している。CZ-A2は表面の凹凸が抑制できたが、内部の界面が酸化劣化していた。以上の結果から、アーク風洞試験条件下ではコスモコート無しでも熱衝撃に耐えることが明らかとなった。一方コスモコートありでは、酸化進行が促進される傾向にあり、コスモコートについて、処理プロセスの見直しおよび最適な付加コート材の種類・量を検討する必要があることが示唆された。

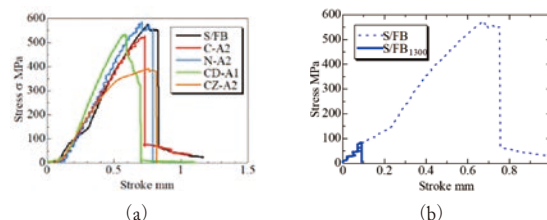


図 3-1 応力変位線図（曝露試験前後の4点曲げ試験結果）

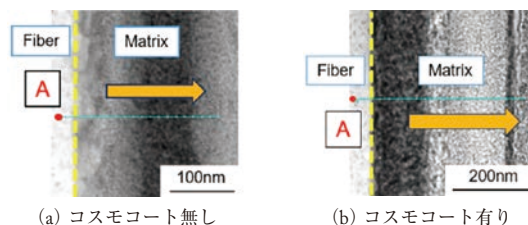


図 3-2 繊維/マトリクス界面近傍TEM像

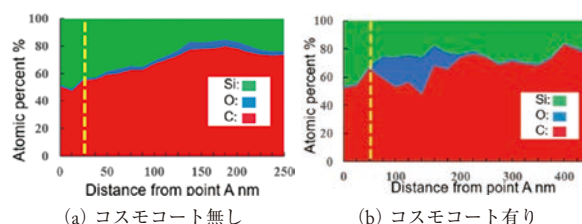


図 3-3 EDS線分析

小林正和研究室

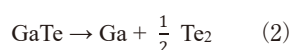
我々の研究室では

- ・新規太陽電池用材料の開発
- ・格子不整合基板上への高品質 ZnTe ヘテロエピタキシー技術の開発、導波路型デバイス応用に関する研究
- ・ナノ微粒子の作製に関する研究

を行っている。

今年度に行った研究のうち新規太陽電池用材料の開発に関する内容について以下に述べる。

弊研究室ではカルコパイライト材料の一つである AgGaTe_2 を用いた太陽電池の作製をおこなっている。 AgGaTe_2 を用いた太陽電池作製のために、 Ga_2Te_3 を近接昇華法のソース原料として使用して AgGaTe_2 薄膜の組成をストイキオメトリに近づける研究が過去行われていた。こうして $\text{ZnO: Al/ZnIn}_2\text{S}_4/\text{AgGaTe}_2/\text{Mo/Glass}$ 構造の太陽電池を作製した際、変換効率は 0.01% 程度と太陽電池化に成功しているとは言えない結果であった。このとき、 AgGaTe_2 薄膜内への Te の混入が多く、Te-rich な AgGaTe_2 薄膜が作製されていた。そのため、 AgGaTe_2 薄膜を作製するときの近接昇華法のソース原料について、 Ga_2Te_3 から GaTe へと変更され、Ga: Te 組成比が Ga の多い状態になった。こうして GaTe 粉末を使用して作製された AgGaTe_2 薄膜は Ga_2Te_3 粉末を使用した従来の薄膜よりも組成が大幅に改善された。この理由について、 Ga_2Te_3 と GaTe を加熱した際の分解反応の違いが関係していると考えられている。以下に Ga_2Te_3 と GaTe の分解反応の式を示す。



Ga_2Te_3 の分解には式 (1) が行われたのち式 (2) が行われていたため、Ga の昇華量と比較して多量の Te の昇華が見られていた。しかし、 GaTe の分解は式 (2) のみで完結しており、 Ga_2Te_3 粉末使用時と比較して Te の昇華量に対する Ga の昇華量の割合が増加していると考えられる。 GaTe 粉末を使用して作製された薄膜を使用して太陽電池の作製を行うと、太陽電池の変換効率は約 10 倍に向上し、0.137% を示した。 AgGaTe_2 薄膜の組成の改善によって太陽電池化に成功したことから、 AgGaTe_2 薄膜の組成に引き続き注目して AgGaTe_2 太陽電池の変換効率向上を目指すこととした。

ここで、 AgGaTe_2 と同じくカルコパイライト構造を持っている CIGS 太陽電池で行われていた研究に着目した。CIGS 薄膜では、組成のずれが伝導のパターンに関して大きな影響があり、1 割～2 割程度の Cu 不足領域では弱い p 型伝導を示すことが知られている。CIGS 太陽電池では、

Cu 不足領域の作製のために CIGS 薄膜内の組成を 2 割程度 Ga-rich にした太陽電池が作製されており、20.3% の変換効率が報告されている。また、従来より Ga-rich な AgGaTe_2 薄膜作製のための研究が行われていて変換効率が改善する傾向がみられていた。そのため、 AgGaTe_2 太陽電池でもストイキオメトリよりも Ga-rich な AgGaTe_2 薄膜を作製し、その薄膜を使用した太陽電池を作製することで変換効率の向上につながるのではないかと考えた。

GaTe 粉末をソース原料として近接昇華法を行うと、式 (2) に示した GaTe の分解反応が発生したのち Ga と Te に分かれて昇華が発生することが知られている。このとき、拡散・昇華時間の延長に比例して Ga と Te の拡散量がそれぞれ増加していくことがわかっていた。そのため、拡散・昇華時間の延長は Ga の拡散量の増加と Ga-rich な AgGaTe_2 薄膜の作製に有効であることが期待される。

他の方法としては、ソース原料の Ga: Te 組成比の変更である。従来の研究において、近接昇華法のソース原料を Ga_2Te_3 粉末から GaTe 粉末に変更したことで Te の拡散量を抑制し、Ga の拡散量を大幅に増加させることができていた。この結果から、近接昇華法ソース原料の組成を GaTe よりもさらに Ga: Te 組成比が Ga の多い状態にすることができれば、さらなる Ga の拡散量の増加が期待できるのではないかと考えた。

拡散・昇華時間の増加

従来の研究では、近接昇華法の拡散・昇華時間は 10 分前後であることがほとんどであり、 AgGaTe_2 薄膜がストイキオメトリな状態になったのも拡散・昇華時間が 10 分のときである。近接昇華法の拡散・昇華時間の増加によって従来よりも Ga の拡散量の増加と Ga-rich な AgGaTe_2 薄膜の作製が期待される。そのため、近接昇華法における 650℃ での拡散・昇華時間を 30 分、45 分、60 分として従来の 10 分よりも増加させることにより、Ga-rich な AgGaTe_2 薄膜の作製を目指した。

まず、 SiO_2 基板上に裏面電極層である Mo を RF マグネトロンスパッタリング法により堆積させた。その後、RF マグネトロンスパッタリング法により Ag_2Te バッファ層を堆積させる。そこに、ソース原料として GaTe 粉末を用いて 0.3 Pa (2.2×10^{-3} [mm Hg]) の圧力下で近接昇華法を行い Ga と Te を供給することで、 $\text{SiO}_2/\text{Mo}/\text{AgGaTe}_2$ 構造の AgGaTe_2 薄膜を作製する。作製した AgGaTe_2 薄膜は、XRF (JSX-1000S, JEOL, Japan) により薄膜の元素組成比についての確認を行う。その後、X-ray diffraction (XRD) (Smart Lab, Rigaku, Japan) θ -2 θ 法により生成物の特定と結晶性の評価を行う。

表1 Mo/Glass上に拡散・昇華時間を変化させて成長したAgGaTe₂薄膜のXRF測定結果

T _{depo}	10min		30min		45min		60min	
	Intensity (count)	Conc. (mol%)	Intensity (count)	Conc. (mol%)	Intensity (count)	Conc. (mol%)	Intensity (count)	Conc. (mol%)
Ag	10000	27.5	16000	18.9	16000	15.8	17000	14.5
Ga	160000	23.2	430000	29.2	510000	32.0	530000	30.9
Te	4000	49.3	10000	51.9	11000	52.2	15000	54.6
Ga-richな割合 [%]	-7.2		16.8		28.0		23.6	

表1は拡散・昇華時間を増加させたときにおけるAgGaTe₂薄膜のXRF測定結果である。拡散・昇華時間の増加に伴い、GaとTeの積分強度が増加していったことがわかる。拡散・昇華時間を増加させて作製したときは、拡散・昇華時間が10分の時と比較してGaのモル比率も増加していき、Ga-richなAgGaTe₂薄膜を作製することができた。

図1は近接昇華法の拡散時間を増加させて作製したAgGaTe₂薄膜をXRD θ-2θ測定により分析したものである。

AgGaTe₂ 拡散時間を増加させたことで25.8°付近に新たなピークが出現するようになった。XRF測定の結果、AgGaTe₂ 薄膜はGa-richな状態になっていることがわかっており、そのため、25.8°付近のこのピークはAgGaTe₂ の112回折よりもGa-richなAgGa₅Te₈ の124回折であると推測した。

また、XRFとXRDの結果を合わせて比較をすると、AgGaTe₂ 層におけるGa-richな割合が増加すると24.9°付近のAgGaTe₂ 由来の回折ピークの幅が広がり、結晶性が低下していることが確認された。それに伴い、24.9°付近の回

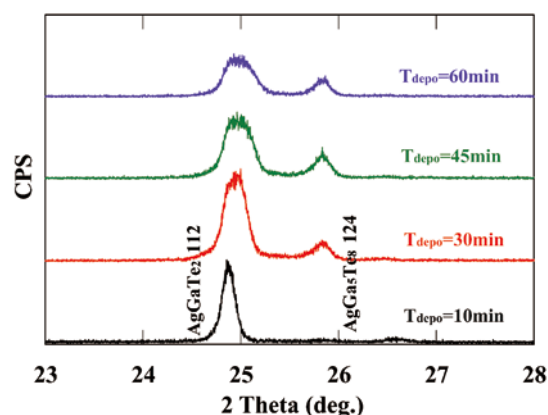


図1 Mo/Glass上に拡散・昇華時間を変化させて成長したAgGaTe₂薄膜のXRDスペクトル

折ピークの幅の広がりが大きくなり、回折ピークの位置は高角度側へと移動した。これは、薄膜のAgGaTe₂ 結晶がGa-richな結晶から影響を受けているため発生していることだと考えられる。現在太陽電池化とその電気的特性の詳細については検討をすすめているところである。

層状ケイ酸塩とメソポーラスシリカナノ粒子の共集合による階層的多孔質材料の作製

シリカ系多孔質材料は高い比表面積、熱的・化学的安定性を有し、触媒、吸着、医薬品、電子デバイスなど様々な用途に利用されている。多孔体の合成手法として、分子をはじめナノスケールの構造体をビルディングブロックとして集積する手法は合理的な設計手法として近年注目されている。メソポーラスシリカナノ粒子 (MSNs) はナノスケールのシリカ粒子内部にメソ細孔を有し、粒子内・粒子間の細孔を利用した階層的な多孔体の設計に有用である。また、結晶性のシリカナノシートが積層した構造を有する層状ケイ酸塩は、層間空間に分子やナノ粒子を導入可能であり、ピラー化や層間縮合による多孔体の作製が報告されている。しかし、これまでに合成された材料は主にマイクロ孔のみを有し、層状ケイ酸塩表面を利用した例は限られている。

本研究では、層状ケイ酸塩マガディアイトの剥離と、剥離されたナノシートとメソポーラスシリカナノ粒子の共集合による多孔体の作製を行った (Fig. 1)。得られた多孔体は階層的なメソポーラス構造を有しており、マガディアイトに由来する高い比表面積、結晶性と優れた吸着特性を示した。

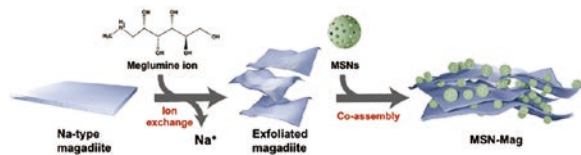


Fig. 1 マガディアイトとMSNsの共集合による階層的メソ多孔体の作製 Adapted from *Langmuir* 2025, 41, 25954. Copyright 2025, American Chemical Society.

まずマガディアイトの剥離によるナノシート分散液の調製を行った。既報に従い、水熱法により合成したNa型マガディアイトの層間に、Naとメグルミンカチオンのイオン交換を行った後、水へ分散させ剥離を行った。得られた分散液は透明でチンダル効果を示した。ゼータ電位は -15.4 mVを示し、ナノシートが負電荷を帯びていることが確認された。形態を評価するため、希釈した分散液をシリコン基板上に滴下し、乾燥させてAFM観察を行った結果、ラテラルサイズ $1\ \mu\text{m}$ 、厚さ $2\ \text{nm}$ 程度の板状粒子を観測した。マガディアイトの単一のシリケート層の厚さは約 $1.15\ \text{nm}$ であることが知られているため、表面に吸着したメグルミンと単層のシートが複合した状態であると考えられる。

MSNsは既報に従い、ヘキサデシルトリメチルアンモニウムブロミド ($\text{C}_{16}\text{TMABr}$) とトリエタノールアミン (TEA) およびオルトケイ酸テトラエチル (TEOS) と水を用いてゾルゲル法により合成した。MSNsは $+30.8\ \text{mV}$ のゼータ電位を示したため、負電荷を帯びたマガディアイトナノシート分散液と正電荷を帯びたMSNs分散液を混合することで、静電相互作用による共集合を行った。混合した際、白色の沈殿が速やかに形成され (MSN-Mag)、分散液中でナノシートとMSNsが集合していることが示唆された。SEM、TEMおよび断面TEM像からナノ粒子とナノシートが複合化している様子が観察された。MSN-MagのFT-IRスペクトルより、 C_{16}TMA カチオンおよびメグルミンの残存を確認した。塩酸による酸処理後 (MSN-Mag-Acid)、有機物由来のバンドはほとんど消失した。また、窒素吸脱着等温線はH2型のヒステリシス曲線を示し、BET比表面積は $909\ \text{m}^2\ \text{g}^{-1}$ であった (Fig. 2)。BJH法により算出した細孔径分布は $3.03\ \text{nm}$ と $11.5\ \text{nm}$ に極大値を示した。 $3.03\ \text{nm}$ はMSNsに由来する細孔であり、 $11.5\ \text{nm}$ は粒子間隙に帰属される。

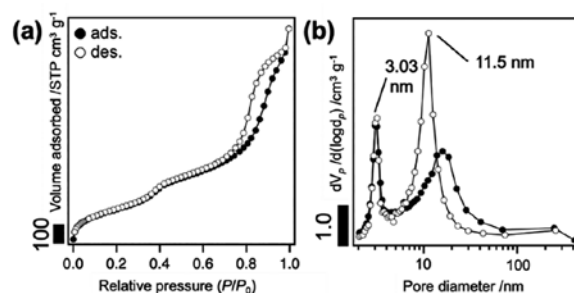


Fig. 2 MSN-Mag-Acidの (a) 窒素吸脱着等温線および (b) BJH法により算出された細孔径分布 Adapted from *Langmuir* 2025, 41, 25954. Copyright 2025, American Chemical Society.

合成された多孔体は高いBET比表面積と2つの異なる細孔径を有することから、階層構造を利用した高機能吸着材や不均一触媒としての応用が期待される。マガディアイトに由来する結晶性の細孔壁は吸着サイト、触媒活性点の設計の観点からも有用である。

以上から、マガディアイトの水相剥離および、マガディアイトとMSNsの共集合による階層的なメソ多孔体の合成に成功した。階層的細孔構造による拡散性の向上および、マガディアイト由来の結晶性と表面SiOH基を有する細孔壁を利用した高機能材料への応用が期待される。

ナノ空間内における FeCl_3 前駆体の拡散および酸化による単結晶性 $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ナノ多孔体の作製

金属酸化物ナノ多孔体は、触媒、エネルギー材料、センサー、生体材料など幅広い分野で応用されている。その特性は化学組成や細孔構造、細孔壁を構成する結晶子の大きさなどが関係するため、これらのファクターを制御することは重要な課題である。特に、単結晶に多数のナノ細孔が空いた「単結晶性ナノ多孔体」は単結晶に由来する高い電荷輸送性や熱的安定性と、高比表面積で内部までアクセス可能なナノ多孔体の特徴を兼ね備えており、高い触媒活性や電極性能を示すことが知られている。しかし、細孔構造と結晶性を同時に精密制御することは困難で、一般的な金属酸化物ナノ多孔体は細孔壁が多数の微結晶から構成される。本研究では、高い蒸気圧をもつ金属塩化物に着目して、気相拡散と酸素との反応を経由して鋳型内部で結晶成長を進める新しい合成手法 C^3 (Chemical-vapor-based Confined Crystal growth) 法を開発した。規則配列したシリカナノ粒子集積体(シリカコロイド結晶)を鋳型として用い、その粒子間隙に FeCl_3 水溶液を含浸させ、空气中で加熱することで、球状細孔がfcc配列した3-Dimensionally Ordered Macroporous (3DOM) 構造を有する単結晶性 $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ を合成した (Fig. 1)。

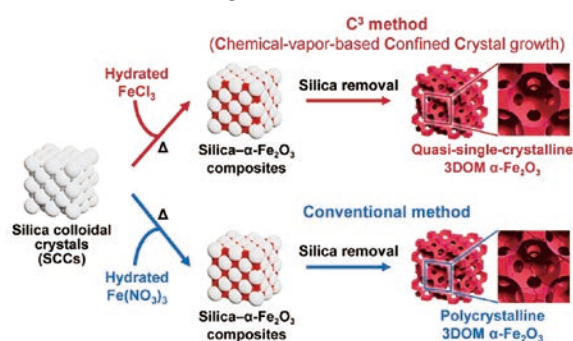


Fig. 1 塩化鉄の気相拡散と酸素との反応を経由した単結晶性 3DOM $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ の合成. Adapted from *Chemistry of Materials* 2025, 37, 5005. Copyright 2025, American Chemical Society.

粒径55 nmのシリカナノ粒子からなるシリカコロイド結晶を作製し、その細孔に FeCl_3 水溶液を含浸した後、乾燥・焼成した後、 NaOH 水溶液でシリカを除去した。比較のため、一般的な前駆体である $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ を用いて同様の検討を行った。XRD, SAXS, SEM, TEMなどの分析から、 FeCl_3 を用いた場合には、鋳型の細孔構造を転写した3DOM構造をもつ $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ が得られた。SAEDパターンではスポットが観測され、高分解能TEMでも格子縞が連続していたことから、細孔壁は数百nmにわたって連続

した大きな結晶から成ることが確認された (Fig. 2a-c)。一方、硝酸鉄を用いた場合には、細孔壁はランダム配向したナノ結晶の集合体であり、1回の前駆体含浸では3DOM構造を形成できず、多数回の含浸・焼成を要した (Fig. 2d, e)。

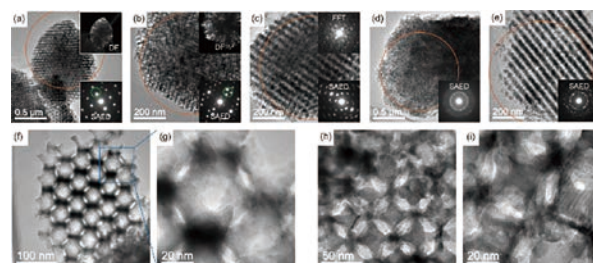


Fig. 2 (a-c) 単結晶性 3DOM $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, (d, e) 多結晶性 3DOM $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ のTEM像とSAEDパターン. Adapted from *Chemistry of Materials* 2025, 37, 5005. Copyright 2025, American Chemical Society.

上述の結晶性の違いは $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ の形成過程の差によると考えられる。 $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$ では熱分解により前駆体中で核生成が起こり、体積が収縮しつつ $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ナノ結晶が同時多発的に生じるため、鋳型内部で連続的な結晶成長が起こりにくいと考えられる。これに対し FeCl_3 は熱分解せず、加熱により鋳型内を拡散しつつ、酸素と反応することで FeOCl を経て $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ を形成する。この際、気相で Fe 種が連続供給されるため、ナノ空間という制限場内でも核結晶成長が進みやすく、大きな結晶子から成る細孔壁が形成されたと考えられる。さらに焼成時の酸素供給量は粒子径や鋳型外析出に影響し、酸素が少ない条件では粒子成長が進みやすく、酸素が多い条件では外部析出が抑制されつつ小粒子化することが分かった。

得られた材料の特性評価として、メチレンブルーの光フェントン反応による分解を行った。単結晶性 3DOM $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ は、多結晶性 3DOM $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ に比べて比表面積が小さいにもかかわらず、より高い触媒活性を示した。これは、結晶子の粒界が低減したことで電子と正孔の再結合が抑制されたためと考えられる。また熱安定性の向上も確認された。単結晶性 3DOM $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ では900 $^{\circ}\text{C}$ まで規則細孔が維持されたのに対し、多結晶性 3DOM $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ では800 $^{\circ}\text{C}$ でも構造規則性が大きく低下した。

以上より、本研究は金属塩化物の揮発性と気相輸送を活用することで、従来法では困難だった高秩序・高結晶性の酸化鉄ナノ多孔体が比較的単純な焼成操作で得られることを見出した。この C^3 法は他の金属酸化物ナノ多孔体にも展開が期待でき、将来的には結晶性とナノ構造を両立した高機能ナノ多孔体設計の基盤技術となりうる。

菅原義之研究室

多孔質材料の作製及びその特性評価

メソポーラス材料は、制御可能な細孔径および高い比表面積といった構造的特徴を有し、さまざまな分野で注目されている。これらの特性に加え、多様な組成および構造により、吸着、分離、触媒、エネルギー関連技術、さらにはバイオメディカル分野に至るまで、幅広い応用が期待されている[1]。例えば、高い比表面積および大きな細孔容積は、吸着や反応物との接触、ならびに標的分子やイオンのアクセス性を向上させる。また、薄い細孔壁は電荷移動や分子・イオン拡散に対して効率的な経路を提供し、機能性骨格は触媒活性や光学的・電気的特性などの発現に寄与する。現在までに、シリカ、カーボン系材料、ポリマー、金属酸化物など、多様なメソポーラス材料が開発され、さまざまな分野で応用されている。

(1) 高分散CoFe系ナノ粒子を担持した窒素ドーブメソポーラス炭素の開発及び酸素還元反応における触媒活性の評価[2]。

多様なメソポーラス材料の中でも、カーボン系メソポーラス材料は、優れた電気伝導性および高い機械的・化学的安定性を有することから注目されている。特に、メソポーラス金属-窒素-炭素(M-N-C)材料は、燃料電池や金属-空気電池における重要反応である酸素還元反応(ORR)に対する有望な電極触媒材料の一つである。これらの材料は、高い電極触媒活性とカーボンの優れた導電性、安定性を兼ね備えている。さらに、メソポーラス構造は物質輸送および活性サイトの露出に有利である。しかしながら、アクセス可能な活性サイト密度の不足が実用化における制約要因となっている。

これらの課題を克服するために、二元系金属の導入および金属ナノ粒子のサイズや分散状態の制御が近年注目されている。二元金属触媒は、隣接する金属中心間の協働的な相互作用により、単一金属触媒と比較して高い触媒活性を示す。また、金属ナノ粒子のサイズや分散状態を制御することで、活性サイトへのアクセス性が向上する。

本研究では、窒素を含むドーパミン、ソフトテンプレートとしてのジブロック共重合体(PS-*b*-PEO)、および鉄イオンとコバルトイオンを用い、それらの自己組織化および焼成プロセスにより、CoFe系ナノ粒子を担持した窒素ドーブメソポーラス炭素(CoFe-NPs/NMCSs)の合成に成功した。特に、Feイオンの導入および添加量の最適化により、Co、CoFe合金、およびCoNからなる微小なナノ粒子が窒素ドーブメソポーラスカーボン構造内に均一に分散した構造が得られた(図1)。このような二元系金属ナノ粒子と窒素ドーブメソポーラスカーボンの多孔構造との相乗効果により、活性サイト数の増加、活性サイトへのアクセス性

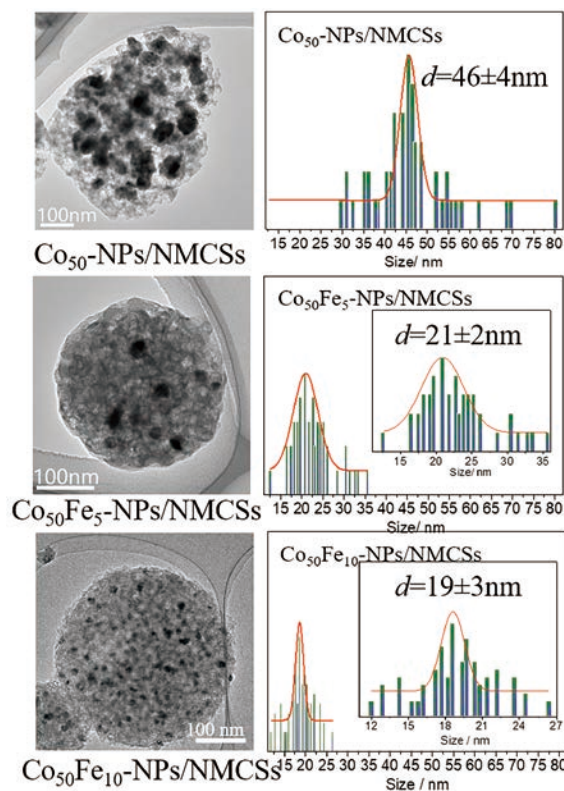


図1. Co₅₀-NPs/NMCSs, Co₅₀Fe₅-NPs/NMCSs, および Co₅₀Fe₁₀-NPs/NMCSsのTEM像とそのナノ粒子の粒径分布。

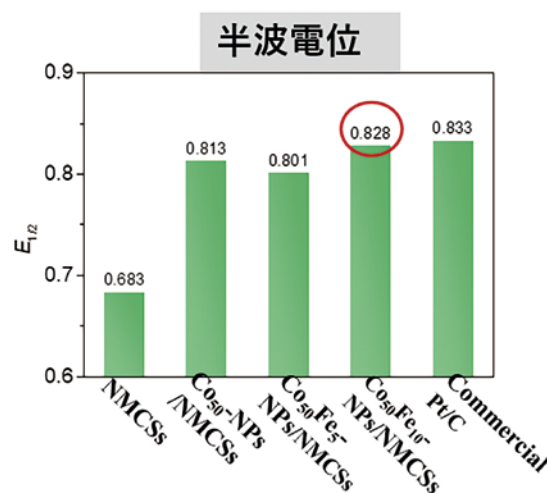


図2. NMCSs, Co₅₀-NPs/NMCSs, Co₅₀Fe₅-NPs/NMCSs, Co₅₀Fe₁₀-NPs/NMCSsおよびPt/Cの半波電位。

の向上、および電荷移動の促進が実現された。その結果、最適なCo/Fe比(Co₅₀Fe₁₀)を有するCoFe-NPs/NMCSsは、アルカリ性媒体中において、0.828 V vs. RHEの半波電位を示し、市販のPt/C (0.833 V)に匹敵する性能と優れた安定性を示した(図2)。

(2) 電荷移動および磁気特性が向上したFeドーピングSnO₂メソポーラス薄膜の合成[3].

二酸化スズ (SnO₂) は、広いバンドギャップ ($E_g \approx 3.6$ eV, 300 K) を有するn型酸化物半導体であり、優れた光学特性および電気特性、機械的安定性、生体適合性、および高い化学応答性を有することから、センサー、太陽電池、光電子デバイス、電子材料、電池など幅広い分野で利用されている。特に、メソポーラス構造を有するSnO₂薄膜は、高比表面積、優れた物質輸送特性、活性サイトの高い露出度および顕著な界面効果を有しており、機能性材料として有望である。

さらに、ヘテロ元素ドーピングは、SnO₂の電子構造および物性の制御に有効な手法である。ドーパントの導入により、結晶粒径の微細化、表面の安定化、および電子状態の調整が可能となり、電気伝導性、光学特性、および磁気特性の向上が期待される。中でもFeドーピングは、磁気特性と電気特性の両立、ガス応答特性および熱安定性の向上に加え、低コストかつ環境適合性に優れることから注目されている。一方、従来のFeドーピングSnO₂は主に緻密なナノ粒子あるいは薄膜として報告されているのに対し、メソポーラス構造の導入は、開放的な細孔構造と大きな比表面積により、電荷輸送および磁気相互作用の向上に寄与すると考えられる。

本研究では、トリブロック共重合体 (Pluronic P123) を鋳型とした蒸発誘起自己組織化 (EISA) 法により、メソポーラス構造を有するFeドーピングSnO₂薄膜を作製した (図3)。Feの導入により、室温における電気伝導性および磁気特性の向上が確認された。さらに、これらの特性はFeドーピング量により制御可能であることが示された。磁気特性は、純SnO₂の反磁性から、低濃度ドーピングにおける常磁性を経て、高濃度における強磁性へと変化した (図4)。この磁気特性の変化は、主として γ -Fe₂O₃ナノ粒子の形成に起因すると考えられる。

参考文献

[1] Y. He, R. Li, H. Tong, W. Wang, J. Zhang, J. Li, D. Zhao,

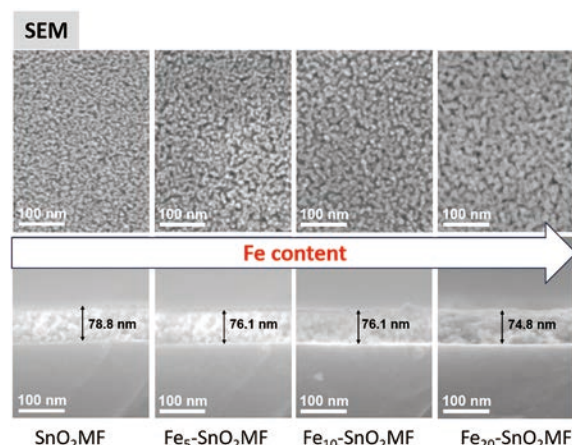


図3. SnO₂MF, Fe₅-SnO₂MF, Fe₁₀-SnO₂MF および Fe₂₀-SnO₂MFのTEM像。

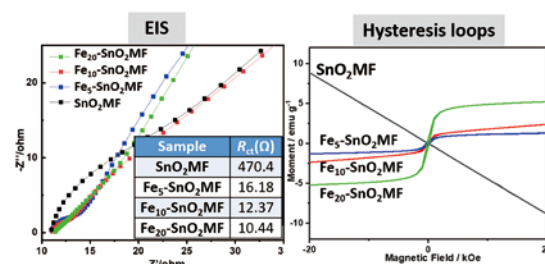


図4. SnO₂MF, Fe₅-SnO₂MF, Fe₁₀-SnO₂MF および Fe₂₀-SnO₂MFの電気伝導性および磁気特性。

- K. Lan, Emerging compositions in functional mesoporous materials. Chem. Soc. Rev., 2025, 54, 6927-6972.
- [2] Y. Li, Y. Guo, N. Ebato, Y. Cui, K. Osada, Y. Yamauchi, Y. Sugahara. Well-Dispersed CoFe-Based Nanoparticles Embedded in N-Doped Mesoporous Carbon Spheres as an Efficient Electrocatalyst for Oxygen Reduction Reaction. ACS Appl. Energy Mater. 2025, 8, 14228-14238.
- [3] Y. Zhou, Y. Guo, Y. Yamauchi, Y. Sugahara. One-step synthesis of Fe-doped SnO₂ mesoporous thin films with enhanced electron transfer and magnetic properties. Ceramics International 51 (2025) 37753-37760.

鈴木進補研究室

2025年度、本研究室では、主に以下の研究を行った。

1) Ni基単結晶超合金TMS-238におけるTCP析出抑制可能なRuとRe量の推定式構築, 2) 分子動力学法を用いた液体金属における原子の拡散挙動評価, 3) Laser powder bed fusionにおけるヘテロ凝固核TiCがTi-6Al-4V粉末の溶融挙動に与える影響, 4) ソーレ効果の精密評価に向けた干涉縞解析の改善と機械学習分子動力学法の検討, 5) ポーラス金属の気孔配列不規則化に従った圧縮応力減少傾向の解明。以下に研究成果の一例を紹介する。

1) Ni基単結晶超合金TMS-238におけるTCP析出抑制可能なRuとRe量の推定式構築

Ni基単結晶超合金TMS-238はクリープ特性に優れ、航空機エンジンの高圧タービンプレード材として有望な合金である。しかし、Reなどの強化元素により析出し高温クリープ特性を低下させるTopologically Closed-Packed Phase (TCP相) 抑制のためにRuを5 wt.%添加しており、商用合金と比べて高価である。そのため、高価なRu重量分率(C_{Ru})を低減させてコストを抑えつつ、高温クリープ特性を維持した合金開発が求められる。Ni基単結晶超合金には構成元素の拡散速度差に起因する組成偏析が存在し、TCP相の析出およびTCP相が及ぼす影響は合金の局所組成に起因する。これらを考慮したうえでTCP相の析出を抑制できる組成を求めることが、新合金開発に向けて重要である。産業利用を想定すると、高価なRuの重量分率を低減しつつも強化元素であるReの重量分率(C_{Re})を低減させずに、TCP相が析出しない合金が求められる。そこで本研究では、Ruの重量分率を低減させたTMS-238をベースとした合金において、TCP相が析出しない C_{Ru} と C_{Re} の関係を定式化することを目的とした。

Ni基単結晶超合金TMS-238 (5Ru) および、これをベースに他合金元素の重量分率を変化させずに C_{Ru} を半減させた合金 (2.5Ru)、不添加の合金 (0Ru) の単結晶丸棒を製造した。一方向凝固による単結晶製造後、1345℃-20 hの溶体化処理、1150℃-2 h、870℃-20 hの二段階時効処理を行った。単結晶丸棒を(100)で切断し、1150℃で24-1000 hの熱処理実験を行なった。Scanning Electron Microscope (SEM) により、横457.3 mm×縦343 mmの画像を取得し、デンドライトコア (DC) 部とインターデンドライト (ID) 部それぞれにおけるTCP相の局所面積率を求めた。Electron Probe Micro Analyzer (EPMA) により、SEMで撮影した測定範囲に対して、ビーム径を10 mmとし、横方向に40点、縦方向に2点、計80点分について各合金の1000 h熱処理試料の C_{Ru} と C_{Re} を測定した。

C_{Ru} を低減させると、DC部ID部のいずれにおいてもTCP相面積率が増加し、いずれの合金でもDC部のTCP相面積率はID部よりも高かった。各合金のDC部におい

て、クリープ特性に悪影響を及ぼすとされるTCP相面積率1%を超える熱処理時間を求めるために、フィッティングを行った。その結果、0Ruでは189 h、2.5Ruでは524 h、5Ruでは1246 hの熱処理でTCP相の面積率が1%を超えた。これによりTMS-238 (5Ru) における C_{Ru} を半減させると、TCP相面積率が1%を超える熱処理時間は約700 h短縮されることが示唆された。

クリープ特性に影響を及ぼすとされるTCP相面積率1%を閾値としてTCP相の析出有無を判断し、2.5Ruにおいて、TCP相面積率1%を閾値とした2つのグループごとに90%確率楕円を描いた。TCP相の析出を抑制可能な C_{Ru} と C_{Re} の関係を推定するために、TCP相面積率1%以上の楕円の接線のうち、正の傾きでTMS-238の C_{Ru} と C_{Re} を通る線を選び、この右下の領域を対象とした。その結果、1150℃-1000 h熱処理においてTCP相面積率が1%未満かつ C_{Ru} が少なく C_{Re} が多い組成域は、式 (1-1) のように表された。

$$C_{Re} < 0.38 C_{Ru} + 4.5 \quad (1-1)$$

2) 分子動力学法を用いた液体金属における原子の拡散挙動評価

液体金属の拡散は材料プロセスにおける物質の輸送を考えるうえで重要な物理現象である。拡散は原子の運動により進行し、分子動力学法 (MD) はそのような原子の挙動を評価する有効な方法である。MDを用いた研究は多く行われているが、個々の原子の拡散挙動評価に焦点を当てた研究は限られている。これは、液体における個々の原子の運動を特徴付けることが困難であるためである。以上より、本研究では液体金属の拡散における個々の原子の微視的挙動の分類方法確立を目的とした。

対象とする系として、自己拡散係数の実験値が得られている、773 Kにおける液体PbのMDを実行した。原子間ポテンシャルとしてPreFerred Potential ver5.0.0、シミュレーションソフトとしてMatlantisを使用した。4000個のPb原子を周期境界条件下のMDセル内に面心立方構造で配置し、各原子にはシリアル番号 (ID) を付与した。系はBerendsenサーモスタットによって制御し、ニュートンの運動方程式を速度-Verlet法により数値積分した。計算stepは1 fsを1 stepとした。Matlantisの計算モードは分散力補正なしとした。平衡となる数密度を決定するための事前計算を行い、その後本計算を実行した。事前計算では温度773 K、圧力 1.01×10^5 PaのNPT制御下で10000 fs計算を実行した。このとき初期数密度は 27.9 nm^{-3} に設定した。最後の1000 fsにおけるMDセルの体積に対して時間平均をとり平衡体積を求め、平衡となる数密度を計算した。得られた平衡となる数密度を用いてNVT制御下で本計算を実行した。初期圧力は 1.01×10^5 Paとし、10000 fsの平衡化

後対象とする計算を100000 fs実行した。出力は10 fsごととした。終了したのち、本計算の全時間範囲における原子の座標から自己拡散係数 D を計算した。自己拡散係数は $2.83 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ であり、実験値のエラーバー範囲内であった。以上より、本MDが773 Kの液体Pbを再現していることが確認された。

一つの原子に着目したところ原子が移動の方向を大きく変えるとき、速さは極小値となっていた。また原子がその場に留まるとき、原子は完全に停止するのではなくその場での振動を続けていた。以上より各原子に対して全時間範囲をjump, gradual-motion, stayの三種類の区間に分類する、以下の(i)-(vi)の方法を考えた。jumpは他の原子の隙間を通り抜ける大きな移動、stayはほとんど位置を変えない振動、gradual-motionはいずれにも分類できない、両方の性質を持つような運動である。(i) 速さの時間変化を求め、それが極小値を取る時刻を計算する。(ii) (i)で計算された時刻における原子の位置を求め、時間的に隣り合うもの同士を線分で接続する。(i)で計算された時刻における原子の位置のうち、その位置から延びる二つの線分の角度が鋭角となるものを抽出する。(iii) (ii)で抽出された点同士のうち時間的に隣り合うもの同士を再度線分で接続する。同様に、その点から延びる二つの線分の角度が鋭角となるものを抽出する。(iv) (iii)で抽出された点に対して、時間的に隣り合うもの同士の距離を求め、 $g(r)$ の第一ピーク位置を上回るものをjump区間とする。(v) (iii)で抽出された点に対して、時間的に隣り合うもの同士の区間のうち、(iv)以外の区間において、間に速さの極小値が一つもないものをstay区間とする。(vi) jump区間, stay区間のいずれにも属さないものをgradual-motion区間とする。以上の方法を用いて、個々の原子に対して微視的挙動を分類することが可能である。

3) Laser powder bed fusionにおけるヘテロ凝固核TiCがTi-6Al-4V粉末の溶融挙動に与える影響

Laser powder bed fusion (LPBF)は高い設計自由度と造形精度を有する一方で、急峻な温度勾配に起因して、凝固時に意図せず柱状晶が形成しやすい。加えて、下層に支持部材がない条件で溶融池の形成が不安定化しやすく、造形品質が著しく低下することが問題である。

Ti-6Al-4V粉末へのTiCヘテロ凝固核の添加が、溶融挙動と凝固挙動を改善することが示唆されている。具体的には、TiCが不均質核生成サイトとして作用し、微細かつ等軸な結晶粒の形成を促進する。加えて、LPBFにおいて、TiC添加による相対密度の向上、表面の平滑化、及びスパッタ径の減少が報告されている。しかしながら、TiC添加が溶融挙動に影響を与える因果関係は未解明である。TiCを用いた造形体の品質を保証するためには、その場観察による溶融中の挙動解明が有効だと考えた。

従って本研究は、支持部材がない条件で、TiC添加がTi-6Al-4V粉末のLPBFにおける質量及び熱収支に与える

影響を明らかにすることを目的とした。その場観察した溶融挙動と、加熱領域の平均温度、造形体質量、スパッタ質量の関係を整理した。

TiC粉末を無添加及び2 mass%混合したTi-6Al-4V粉末をそれぞれ試料ホルダに充填し、その場観察装置に挿入した。真空排気後、1.5 sにわたりレーザ照射しながら試料ホルダを直線移動し、レーザ線走査を模擬した。実験条件は、レーザ出力 $P=100, 200, 300 \text{ W}$ 、走査速度 $v=10, 20, 30 \text{ mm/s}$ 、TiC添加の有無を組み合わせた計18条件とした。レーザ照射中における側面及び上面の溶融挙動を、それぞれX線透過法及び二色放射測温法によりその場観察した。レーザ照射終了後、その場観察装置を用いて造形体を撮影した。温度画像から、レーザ照射点付近の加熱領域に設定した関心領域における、レーザ照射中の時間平均温度 T_{ave} を算出した。

試料ホルダと粉末の質量におけるレーザ照射前後の差分をスパッタ質量 m_{spatter} と定義し、測定した。その後、試料ホルダから造形体を取り出し、造形体質量 $m_{\text{melt track}}$ を測定した。

X線透過法により、レーザ入熱で形成した溶融池がレーザ走査方向と逆向きに移動することで造形体を形成する過程が、TiC添加の有無に依らず同一であった。二色放射測温法より、 T_{ave} はTiC添加により増加したことが示された。TiC添加の有無に依らず、 P 及び v の増加に伴い m_{spatter} は増加した。加えて、全ての実験条件でTiC添加により m_{spatter} は増加した。同様に、 $m_{\text{melt track}}$ はTiC添加の有無に依らず、 P の増加、 v の減少に伴い増加した。加えて、すべての実験条件でTiC添加により $m_{\text{melt track}}$ は減少した。

質量及び温度の変化を熱収支の観点から整理する。検査体積は蒸発または溶融した粉末床とした。従って、検査体積の質量 $m_{\text{cv}} = m_{\text{spatter}} + m_{\text{melt track}}$ である。式(3-1)に簡略化した熱収支を示す。左辺は検査体積に投入される熱量、右辺第1, 2項は検査体積の昇温、第3項は相変化を表す。なお、粉末床はバルクに対して熱伝導率が極めて低いため、レーザ照射中の周囲への抜熱は無視した。

$$\alpha^{\text{laser}} P t_{\text{d}} = m_{\text{cv}} C_V (T_{\text{ave}} - T_{\text{pre}}) + L m_{\text{cv}} \quad (3-1)$$

α^{laser} は粉末床のレーザ吸収率、 C_V は比熱、 L はTi-6Al-4Vの凝固潜熱、 T_{pre} は粉末床初期温度である。

TiC添加の有無に依らず、 v が一定の条件では、 P の増加により粉末床への入熱量は増加する。その結果、主に式(3-1)における、溶融される粉末の質量 m_{cv} が増加し、 m_{spatter} 、 $m_{\text{melt track}}$ が増加したと考えられる。一方、 P 一定の条件では、 v の増加に伴い加熱時間が減少する。その結果、粉末が十分に加熱されず、伝熱経路が十分に発達せずに局所的に熱が蓄積して T_{ave} が増加したと考えられる。従って、蒸発に割かれる熱量が増加して m_{spatter} が増加した結果、 $m_{\text{melt track}}$ が減少したと考えられる。

TiC添加が質量及び熱収支に与える影響を整理する。2 mass%のTiC添加により粉末床のレーザ吸収率が5%程度

増大することが先行研究より明らかになっている。TiC添加による T_{ave} の増加率 I_{ave} に前述のエネルギーバランス式を代入すると3-7%と求まった。一方、 I_{ave} の実験値は2-5%であり、計算値が大きく見積もられる傾向があった。これは、温度上昇による蒸発潜熱項や抜熱項の増大を無視した結果であると考えられるが、乖離の傾向は一致する。従って、TiC添加により粉末床のレーザ吸収率が増大することで、蒸発に割られる熱量が増加し、 m_{spatter} が増加した結果、溶融池に残る溶融粉末量が減少し、 $m_{\text{melt track}}$ が減少したと考えられる。

4) ソーレ効果の精密評価に向けた干渉縞解析の改善と機械学習分子動力学法の検討

ソーレ効果とは、温度勾配を駆動力とする物質輸送現象である。この現象のメカニズム解明には、分子動力学法(MD)を用いたシミュレーションが有効である。近年、MD計算を行う上で、原子に働く力を決定するポテンシャル関数として、PreFerred Potential (PFP)などの機械学習ポテンシャルが発展しつつある。この機械学習ポテンシャルは広範な系へ適用可能であるが、実用化にあたっては、ポテンシャルが系の構造や動的性質を正しく再現しているかの検証が不可欠である。そこで本研究の目的は、PFPを用いたMD計算を行い、PFPがどの程度系を再現するか検証することである。加えて、干渉縞解析手法の改善も行ったが、ここでは省略する。

ソーレ係数の実験値が多く存在する水/エタノール系を計算対象とした。PFPを用いた計算では、600分子の純水系と、400分子の純エタノール系を用いた。比較対象として、古典的ポテンシャルによる計算では、TIP4P/2005を用いた1000分子の純水系と、OPLS-AAを用いた1000分子の純エタノール系をそれぞれ構築した。初期構造の作成にはPackmolを用い、分子をランダムに配置した。平衡化計算では、等圧・等温制御するNPTアンサンブルを用いて、1 fs×50000 step計算し系を平衡化させた。続く本計算では、等積・等温制御するNVTアンサンブルを用いて、1 fs×10000 step計算した。本計算の結果を解析することで、動的性質を表す自己拡散係数 D と、系の構造を表す部分二体分布関数 g_{ij} を算出した。

PFPを用いた計算により得られた自己拡散係数のアレキニウスプロットに着目すると、エタノールの計算値は実験値に近くオーダーが一致したが、水の結果は実験値より一桁小さい値となった。次に、40℃における部分二体分布関数 $g_{ij}(r)$ に着目すると、PFPで得られた g_{ij} のピーク位置は、古典力場による結果と概ね一致していた。水の g_{OO} に着目すると、PFPの結果はTIP4P/2005に比べ、ピーク高さが大きく、ピーク間の谷がより深い形状を示した。また、エタノールの g_{OH} では、PFPの結果において新たなピークが見られた。

PFPの学習元であるPerdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 汎関数は、水分子間の水素結合を過大評価する傾向がある

ため、自己拡散係数は実験値よりも小さくなり、 g_{OO} の第一ピークが高くなることが知られている。本研究におけるPFPの計算結果はこの傾向と一致しており、学習の過程で、PBE汎関数の特性がPFPに受け継がれたものと考えられる。次に、拡散係数の結果に基づき、水/エタノール系におけるソーレ効果のMD計算に必要なシミュレーション時間を見積もった。系として、300分子ずつの水とエタノールを含む、アスペクト比1:1:2のボックスを仮定した。密度を0.9 g/cm³ (9×10² kg/m³) とすると、ボックス長手方向の長さ(2w)は、52 Å (5.2×10⁻⁹ m)となる。このとき、分子拡散により濃度分布が緩和するのに要する時間 t は次式で計算される。

$$t = 3t_r = \frac{3w^2}{D} \quad (4-1)$$

ここで t_r は水の自己拡散における緩和時間である。本研究で得られた水の拡散係数を D として代入すると、 t は13 nsと算出された。これより、ソーレ効果による濃度勾配が定常状態へ至るには、最低13 nsの計算時間が必要である。

PFPは、古典力場で得られた水とエタノールの液体構造を概ね再現する。一方で、PFPによる水の自己拡散係数は、実験値よりも桁が一つ小さくなり、ソーレ効果による濃度勾配の再現には、最低13 nsのシミュレーション時間が必要である。

5) ポーラス金属の気孔配列不規則化に従った圧縮応力減少傾向の解明

ポーラス金属は内部に多数の気孔を有し、圧縮中に応力がプラトー化することで衝撃吸収材として利用される。近年、金属積層造形法などの製造技術の発展により、セル壁の形状や配置といった構造を詳細に設計することが可能となった。そこで構造と剛性の関係を明らかにし、産業利用時の許容応力に応じた構造の最適化により高いエネルギー吸収効率が実現すると期待される。従来研究では主に気孔率に基づく剛性制御が検討されてきたが、気孔配列や形状などの局所的構造が剛性に与える影響は十分には理解されていない。澤田は、気孔配列が不規則なモデルから、ひずみが帯状に集中する領域(以下、予変形帯と呼ぶ)のひずみを抑制するように気孔配列を移動させることで、同じ圧縮ひずみにおいて圧縮応力が増加することを明らかにした。このことから、気孔配列を不規則にすることで、構造的に低剛性となる領域が生じることで予変形帯上のひずみが増加し、圧縮応力が減少するのではないかと考えた。本研究では、様々な不規則度を有する気孔配列の方向性ポーラス金属を対象に有限要素解析を行い、構造不均一性に起因するひずみ局所集中量と圧縮応力低下との関係を近似式として整理することを目的とした。

解析に使用したモデル形状は直径 $D=3$ mmの方向性気孔を多数有する一辺25 mmの立方体とした。規則配列は、気孔中心間距離4.8 mmとした。加えて、規則配列におけ

る各気孔中心の座標にランダムな変位を与えることで16種類の不規則配列を作成した。気孔率は全て35.5%とした。ここで、気孔率を一定にするためにモデル端の気孔体積は気孔配列を移動させた際にも一定とした。気孔配列の不規則度は、規則配列からの各気孔の変位量 R を算出し、 D で正規化した全気孔の平均変位 R_{ave}/D により定義した。モデルの材料特性はA6061-Oのノンポラス材料の圧縮試験結果から定義された。有限要素解析にはAbaqus/Explicit 2024を用いた。解析は圧縮ひずみ $\epsilon=30\%$ に到達するまで実施し、相当塑性ひずみ分布を取得した。各モデルを気孔長手方向に対して垂直方向の2種類からそれぞれ圧縮シミュレーションを行った。予変形帯のひずみ集中量増加と圧縮応力の低下との関係を定量的に示すため、澤田によって確立された変形帯の定義手法を適用した。まず、セル壁中心から1 mmの範囲内における最大相当塑性ひずみを、当該セル壁の代表値として算出した。次に、各気孔配列に対し、モデル側面から3 mm以内に中心が位置する気孔を変形帯の端部と定義した。そのうえで、モデルの左端から右端へ隣り合う気孔を連結する経路を探索した。これらの経路のうち経路内のセル壁におけるひずみの代表値の平均が最大となるものを変形帯として定義した。

全モデルで、 $\epsilon=10\%$ まではセル壁破断が起きず、一部のモデルでは圧縮直後からひずみの集中が明確となった。またその範囲において R_{ave}/D 増加に従って圧縮応力が減少した。その圧縮ひずみにおける相当ひずみ分布より、規則配列ではモデル全体にひずみが均一に分布している様子が見られた。一方で、不規則配列では、定義された変形帯と

同じ箇所にひずみが集中している様子が見られた。この傾向は他のモデルでも同様に見られた。

これは気孔配列の不規則化により薄肉なセル壁やせん断変形のしやすい角度を有するセル壁が増加することで、そのセル壁にひずみが集中した。加えて、その近傍のセル壁にひずみが伝播した結果だと考えられる。予変形帯上のひずみ平均値 $\bar{\epsilon}_{ave}^P$ 圧縮ひずみ10%における圧縮応力 σ_{10} の関係を示した近似直線は決定係数0.76で以下のように示された。

$$\sigma_{10} = -21.2\bar{\epsilon}_{ave}^P + 54.6 \quad (5-1)$$

ある程度良好な負の相関を示したもののばらつきも見られた。近似式に対して σ_{10} が上振れたモデルでは、定義された変形帯以外に大きなひずみを有するセル壁が存在しないため、明瞭な予変形帯のみが形成されていたことが考えられる。一方、近似式に対して σ_{10} が下振れたモデルでは、定義された変形帯外にも大きなひずみを有するセル壁が存在し、圧縮応力の低下につながったと考えられる。この傾向において圧縮方向による顕著な差異は観察されなかったことから、構造に依存せず予変形帯に集中するひずみの増大に伴い圧縮応力が類似の傾向で低下することが示された。

以上より、気孔配列不規則化に従い、帯状の領域にひずみが集中する。それにより圧縮ひずみ10%では近似式(5-1)で示されるように、セル壁が破断するまでの圧縮応力は減少するという知見を得た。

加圧メタン乾式改質の低温化と炭素析出の抑制

1. 緒 言

メタン乾式改質 (DRM) はメタン (CH_4) と二酸化炭素 (CO_2) から合成ガス ($\text{H}_2 + \text{CO}$) を得る反応である。温室効果ガスであるメタンや二酸化炭素から有用な化学原料のである合成ガスを製造可能であり、特にバイオガスや発酵ガスの転換への応用が期待されている。工業化学プロセス上、ではこの反応は加圧条件でDRM反応を行うことが好ましい。しかし、従来の加圧DRM反応は一般に800℃程度の高圧条件が必要である上に、炭素析出による触媒の失活が課題であり、実用化に向けて更なる検討が必要である。本研究では、触媒の反応場に微弱な電流を印加する手法に注目した。電場の印加により、表面プロトンクスや格子酸素の活性化などによる従来の熱場のみの触媒反応とは異なるメカニズムの反応進行が示唆され、 CO_2 のメタネーション反応やアンモニア分解反応などの反応系で、反応の低温化や熱場の平衡転化率の打破など特異的な効果が報告されている[1][2]。本検討ではこの手法を加圧DRM反応に適用し、諸問題の解決に取り組んだ[3]。

2. 実験手法

触媒として、 $\text{La}_2\text{Ce}_2\text{O}_7$ に1 wt%のRuを担持した触媒 (Ru/LCO) を用いた。金属は含浸法により調製した後、水素雰囲気下で還元処理を行った。反応はステンレス製の固定床反応器で実施し、触媒量は300 mg、反応圧力は最大0.90 MPaとした。供給するガス組成は $\text{CH}_4/\text{CO}_2/\text{Ar}=1:1:1$ とし、触媒層中央に挿入した電極へ直流電流を印加した。生成ガスはガスクロマトグラフィーおよび質量分析計を用いて分析した。触媒中の炭素の存在はラマン分光法により評価し、触媒構造および元素分布はFE-STEM-EDSにより観察した。また、触媒表面の化学状態はXPSにより解析した。加えて、触媒の反応機構の理解をするためにニューラルネットワークポテンシャル (NNP) を利用したDFT計算シミュレータであるmatlantis (v.4.0.0) [4] を利用し、触媒上での中間体の安定性および各素過程のエネルギー障壁を検討した。計算モデルではRu/LCOモデルを再現するために、LCOスラブモデルに対して、Ruのロッドを配置したRu/LCOロッドモデルを用いた。Ruの酸化状態の再現にはRuロッド上への酸素原子の吸着を、電場印加の効果に関しては、後述のプロトン供給の効果を再現するために、Ruロッド上に水素原子吸着を行った。

3. 実験結果および考察

図1に電場印加の有無および加圧の有無に応じた CH_4 の転化率および各温度における熱的な平衡転化率を示す。

電場を印加した条件では473 Kの低温条件でも CH_4 が顕

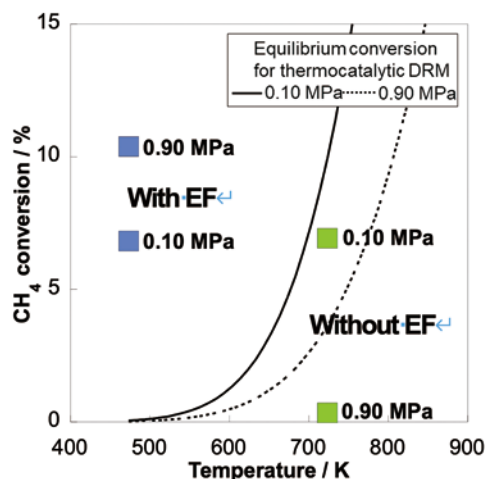


図1 電場印加の有無および加圧の有無に応じた CH_4 の転化率および各温度における熱的な平衡転化率

著に反応し、更に反応圧力を0.10 MPaから0.90 MPaへ上昇させると転化率が更に上昇した。一方で電場を印加しない熱場の触媒反応においては、加圧により触媒活性が低下する傾向が観察された。また、ラマンスペクトルでは約1400 cm^{-1} および1600 cm^{-1} 付近に観測される炭素のDおよびGバンドが電場印加条件ではほとんど検出されず、炭素関連種の生成が抑制されていることが確認された (図2)。

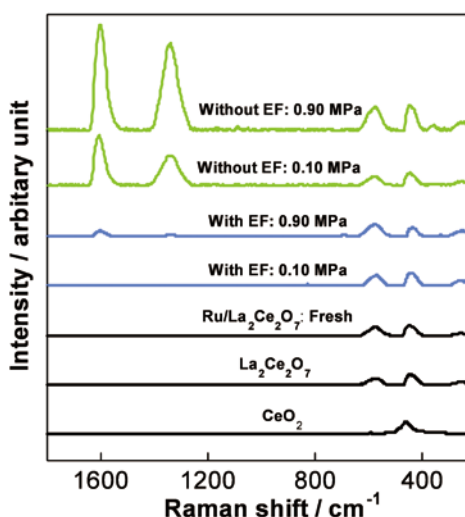


図2 電場印加時及び非印加時の活性試験後のラマンスペクトル

これらの結果は電場の印加により従来高温を必要としたDRM反応を低温で進行させるだけでなく、高圧条件において炭素析出を抑制できることを示している。そのメカニズム解明を目的として、更なる検討を行った。

まず、反応ガスとして CH_4 および CO_2 のみを交互に流下する切り替え試験を行った。電場を印加した場合は CH_4 ガスのみを供給した後 CO が豊富に生じており、その生成挙動が変化したことが確認された。この結果は電場により CH_4 の寄与率が増加していることを示唆している。特に CH_4 から CO に変換される際にはメタンの部分的な水素脱離と酸素原子の結合が重要であり、 CH_xO 種中間体の形成が示唆された。また、反応場における吸着種の種類および量を分析するため、反応場をドライアイスにより急冷し、TPDにより吸着種を分離する実験（コールドトラップ試験）を行った。その結果、電場印加においては、 H_2 由来のシグナル強度が増加し、電場印加時に豊富なプロトン供給が行われることが示された（図3）。

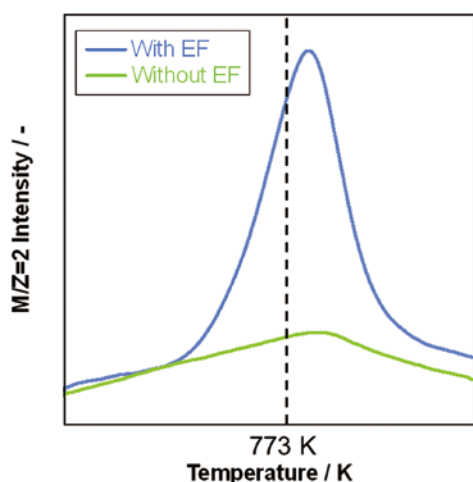


図3 電場印加時および非印加時のコールドトラップ試験において検出された質量分析計における $m/z=2$ のスペクトル

NNPを用いてRu/LCOロッドモデルにおける CH_4 の部分的な水素脱離と部分酸化により生じた中間体の安定性および反応障壁を検討した（図4）。その結果、 CH_4 の水素脱離が進行するほど、 CH_xO 種の安定性が向上することが分かった。したがって、 CHO^* 種が安定な中間体であること

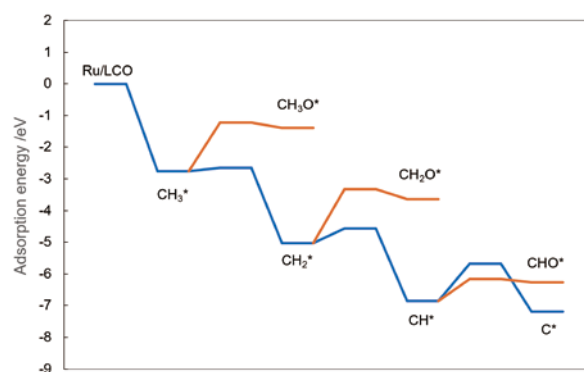


図4 Ru/LCOロッドモデルにおける CH_4 の部分的な水素脱離と部分酸化により生じた中間体の安定性および反応障壁

が示唆された。しかし、 CHO^* 種中間体の安定性は単原子炭素（ C^* ）と比較すると低い。これは通常の熱場において炭素析出が促進する理由であると考えられる。

更に反応経路を追跡し、 C^* に関係する二核吸着種の形成に関して更なる検討を行った。その結果 $\text{C}-\text{C}$ の二核炭素の形成は活性化障壁、エネルギー共に CH^* や CO^* の形成よりも不安定であり、特に C^* の周辺に C^* と H^* が存在する際には CH^* の形成が優先されることが分かった。更にロッド上の水素吸着量を変化させると、その量が増加するほど、 CH^* の形成が好ましいことが分かった。

以上の結果から、電場を印加することにより、反応場において豊富なプロトン源が供給され、それが C^* の CH^* 再形成を促進していることが示唆された。これが見かけ上の CHO^* 種の形成を有利にし、炭素析出を抑制しているのだと考えられる。

4. 引用文献

- [1] Y. Ofuchi *et al.*, *Chemical Science*, 15 (2025) 16869-16878.
- [2] R. Yamano *et al.*, *RSC Advances*, 16 (2026) 10538-10548.
- [3] C. Sampson *et al.*, *ACS Catalysis*, 15 (2025) 12885-12896.
- [4] S. Takamoto *et al.*, *Nat. Commun.*, 13 (2022) 2991.

多辺由佳研究室

電荷移動型混合液晶: SmA 相の流動性

1. 研究背景

液晶材料には様々な有機化合物が合成されており、ディスプレイだけではない広い応用に用いられている。目的によっては粘弾性、電気特性、光学異方性といった特徴に注目し、数種類の液晶化合物を混合して用いることも多い。その中で我々は、2種類の単純なネマチック化合物を混合するだけで、適度な電荷移動が生じて高秩序液晶相が安定化することを見出し、研究してきた。例えば一般的な液晶化合物であるシアノビフェニルとアゾベンゼンを混ぜると、広い混合比と温度領域でSmE相やSmB相が出現する(これらの相は層状構造だけでなく層内の分子重心位置にも秩序を持つ)。アゾベンゼンは電氣的に中性だがシアノビフェニルは電子受容性を持つので、隣接した2分子間では電子がやり取りされて分子間相互作用が強化し、高秩序状態が安定化すると考えられる。SmB相やSmE相は丈夫な薄膜作製にも用いられるため、液晶ディスプレイとは異なる応用にも期待されている。これらの相を単体で示す化合物は入手しにくいのに対し、2種ネマチック液晶化合物の混合で簡単に得られる点は有利と言える。

我々は電荷移動型の混合液晶で薄膜を作製し、平衡構造だけでなく動的物性も調べてきた。その結果、時間的歪が与えられた時の分子配置は、必ずしも安静状態には戻らないことを見出した。本報告では動的物性の特長として、電荷移動混合液晶のバブルに音波を印加したときの振動を記述する。片方をわずかな比率で加えた時、単体と同じ液晶相であるにも関わらず、運動性は大きく変わる。このメカニズムについても考察する。

2. 実験手法

主に用いた化合物は、4-cyano-4'-octylbiphenyl (8CB) と 4,4-di-n-heptyl-azobenzene (7AB7) である。液晶相として、8CB単体はSmA相とN相、7AB7単体はN相を安定に示す。7AB7は電氣的に中性、8CBは電子受容性であることから、混合すると7AB7から8CBに電子が移動すると考えられる。偏光顕微鏡(POM)観察、X線回折(XRD)、示差熱測定(DSC)によって得られた相図を、7AB7の割合を ϕ と表して図1に示す。

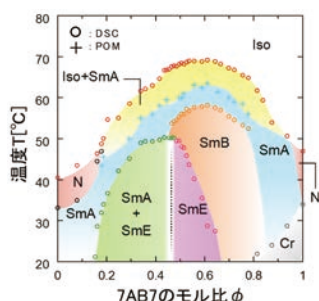


図1: 8CBと7AB7の混合系の相図([1]より参照)

混合試料の動的物性は、安定なバブルに音波をあてて発振を観測・解析した。実験系の模式図を図2に示す。ガラ

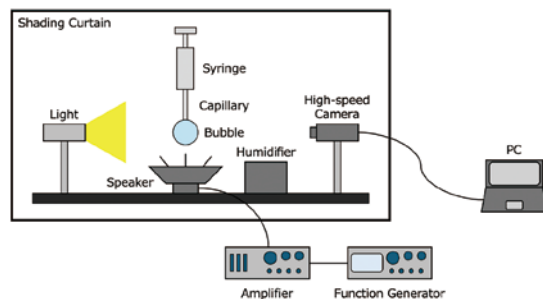


図2: 液晶バブルの音波実験概略図

スキャピラリー先端に試料を塗り、空気を送り込んで半径3~5 mm厚さ1 μm 以下の液晶バブルを作製、スピーカーから音波を出射してバブルの振動を調べた。十分薄いSmA相バブルの音波に共鳴される周波数は、理想的な液滴やバブルの振動に当てはまるLambモデル $\omega_{res} = \sqrt{\frac{2\gamma(l-1)l(l+1)(l+2)}{R^3 \rho_{air}(2l+1)}}$ で記述できる。バブルが $l=1$ の共振を起こす周波数を計算し、スピーカーの音の高さを調整した。一方、高秩序のSmEやSmB相では安定バブルの形成が困難なため、7AB7の割合 ϕ を0.15以下としてSmA試料を作製した。また2種分子が異なる比率で存在する試料の電荷運動も調べるため、誘電緩和測定を行った。

3. 実験結果

基準にしたのは、8CB単体のSmA相(棒状分子は層状に積み重なり層面内の位置秩序は無い)の音波振動である。半径5 mmの8CBバブルに、共鳴振動数118 Hz ($l=1$ に相当)の音波を発したときの、観察像と解析を図3に示す。バブルは共鳴振動しており、その振幅は図3(c)に示すように極座標変換により精度よく求められる。

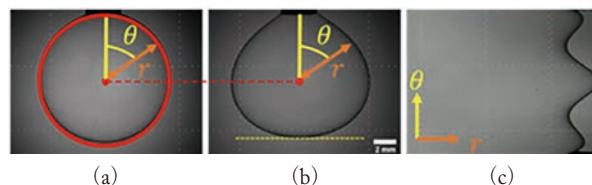


図3: (a), (b) 8CB単体のSmA相バブルに118 Hz音波をあてたときの高速カメラによる撮影像。これは $l=1$ の共振に相当。(c) 振動するバブル像の極座標化。中心座標からの距離と偏角を求める。

この音波振動実験を、 $\phi=0 \sim 0.15$ の比率で7AB7を混合したSmAバブルに対して行い、同様に振幅を調べた。その結果、 $l=1$ 振動をする球状バブルで、中心から最も大きく変動する位置における r と θ は、8CB単体バブルと同様に振動を示した。ただし、振幅の大きさと時間依存性には大きな差があった。この特徴が明確に見られる $\phi=0.134$ の混合バブルの振幅の時間変化を図4に示す。8CB

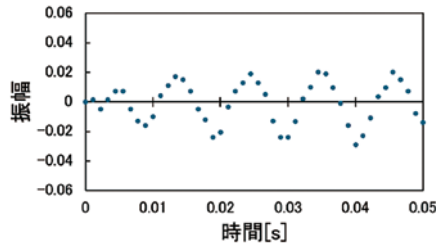


図4：7AB7の比率 $\phi=0.134$ の混合液晶SmAバブルの振幅。
94 Hzの音波による共鳴。

のSmAバブルと同様、振幅の時間変化は、

$$A(t) = A_0(1 - e^{-t/\tau}) \sin(\omega t - \delta)$$

という単振動モデル式に一致している。音波をあてることで共鳴振動が起きているが、その振幅は明らかに小さく、定常状態に達するまでにかかる時間（緩和時間）も長いことが顕著にわかった。複数のバブルで音波による振動を測定し、振幅と緩和時間の混合比 ϕ に対する依存性を調べた結果を図5に示す。 $\phi=0 \sim 0.15$ の混合試料は平衡状態でいずれも均一なSmA相であり、混合比によらず、偏光顕微鏡観察像やX線回折にはほぼ区別が無く、バブルの安定形状も類似している。しかし、静止状態で区別できない混合液晶のバブルに100 Hz程度の音波で振動を励起すると、振幅も緩和時間も単体8CBのバブルとは大きく異なる。室温での測定結果を示した図5では、7AB7混合比が $\phi > 0.06$ を超えたときにバブルは突然、一定速さの運動（振動）に追いつかなくなることがわかる。この速さで、粘弾性が影響するようになる可能性がある。

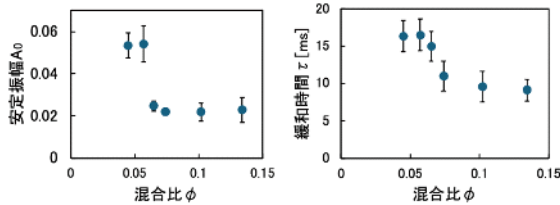


図5：混合液晶バブルの音波共振による振幅と緩和時間。
最も大きく変動する位置の r と θ から解析。

平衡状態においては、 $\phi=0 \sim 0.15$ で7AB7と8CBを混合しても、均一なSmA相が室温で保たれる。7AB7を $\phi > 0.2$ に増やすとSmE相が出現し、SmA相と分離して共存相が偏光顕微鏡でも観測される。SmE相の形成は、8CB分子がと7AB7分子が電子をやり取りしてエネルギーを得るためと考えられている。 $\phi < 0.15$ では相分離は観察されないが、隣接した7AB7-8CBドメイン同士には強い引力

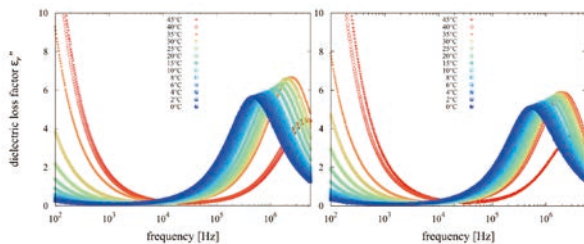


図6：SmA相の誘電率の虚部。(a) 8CB単体 (b) $\phi=0.1$ の
8CB-7AB7混合液晶SmA相からの測定結果。

が働いており、バブルの音波共振に必要な高速分子運動が妨げられる、という可能性がある。一般にSmA液晶相では、分子短軸周りの回転に対応する分極の緩和が $\sim 10^6$ Hzに生じる。音波より桁違いに高速の分子運動であるが、 $\phi < 0.15$ の同じ相での誘電緩和には変化が起きないか、実験を行った。混合試料として $\phi=0$ と $\phi=0.1$ のSmA相を、ガラス基板表面に垂直に配向制御した。誘電率虚部の測定結果を図6に示す。相転移温度もほぼ同じである $\phi=0$ と $\phi=0.1$ の試料では、図6に示す誘電率虚部でもピーク周波数に違いは無く、室温付近で $\sim 10^6$ Hzである。一方、このピークの誘電率の大きさは一致していない。 $\phi=0$ と $\phi=0.1$ では、 10^6 Hzの ϵ_r'' の大きさは $\sim 6:5$ 程度であり、単体SmA相の方が誘電率は大きい。複数の試料を作製して ϵ_r'' を測定した結果、 $\phi=0$ と $\phi=0.1$ で大きさには常に差が生じることが確認された。SmE相がSmA相と共存する混合試料、例えば $\phi=0.4$ であれば、誘電スペクトルの虚部にはSmA相からの $\sim 10^6$ Hz、SmE相からの $\sim 10^5$ Hzという2つピークが出て、 $\sim 10^5$ Hzのピークの方が半分以下と小さい。 $\phi=0.1$ の試料にはダブルピークは確認できず、高秩序相そのものは存在しないと考えられる。 $\phi=0.1$ では、全領域の90%を8CB分子が締めており、7AB7が均一な分布を避けるとしても、可視光の波長に比べれば集合領域の半径は小さい。誘電緩和には全分子の集団運動が必要なく、隣接した7AB7-8CBドメインが疎らにネットワークのような分布をしたら、ピーク周波数は同じになると考えられる。

4. 考察と今後の展望

今回用いたのは、8CBにわずかに7AB7を混入した混合物で、平衡状態では安定なSmA相を広い温度域で示す。このSmA相でバブルを作製し、音波をあてて発振させた結果、7AB7が1割以下加えられただけで、バブル振動の振幅と緩和時間は大きく変化することがわかった。一般にSmA相は、層面内の分子位置には秩序が無く、分子は液体的に自由に動くと考えられている。しかし7AB7分子比が $\phi \sim 0.06$ を超えるだけで、平衡状態は同じSmA相にあるに

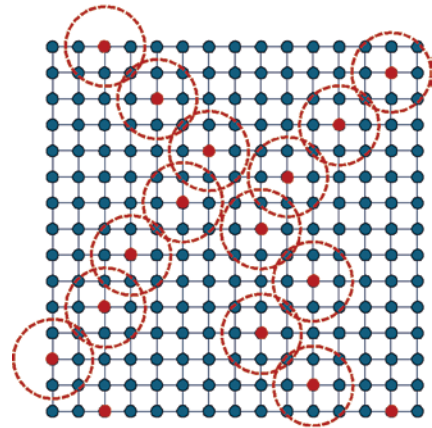


図7： $\phi=0.1$ の8CB-7AB7混合SmA相の1層のモデル。青は8CB、赤は7AB7を示す。

も関わらず、バブル振動の振幅は縮小、緩和にかかる時間は長くなった。これほど少ない割合で 7AB7 が存在するだけで、SmA 相の流動性は大きく下がっている。

一つの仮説として、7AB7 と 8CB の間には電荷移動による分子間相互作用によって疑似的に繊維状構造が生じ、ゲル化のような流動性の低下が生じていると考えられる。低分子の 7AB7 をほんの僅か 8CB に混合するだけで、SmA 相が保たれるにも関わらず、7AB7 分子も 8CB 分子も高速流動できなくなる。2 分子間に働く相互作用が適度な強さを持てば、両分子が隣接した構造が引き合って直鎖のよう

につながり、図 7 に示すようなゲルに近い状態になっている可能性がある。今後、2 種分子の空間分布が観測できるよう試料と実験系を工夫して、動的性質のメカニズムを明らかにする予定である。

【参考文献】

- [1] Shin-ya Sugisawa and Yuka Tabe, *Soft Matter* 12, 3103 (2016).
- [2] 近藤 怜, 2025 年度修士論文.

平田秋彦研究室

金属ガラスの原子クラスターに潜むトポロジ的秩序

[緒 言]

非平衡材料科学研究室では、アモルファスや準結晶に代表される非平衡材料の主に原子配列に着目し、実験およびシミュレーションによる特徴抽出と包括的理解を目指している。今年度は、Cu-Zr金属ガラスの原子クラスターに潜むトポロジ的秩序について、主に分子動力学法を用いたシミュレーションを行った。特に、Cu原子を中心とした短距離秩序構造について詳しく調べた。以下、得られた成果について報告する。

金属ガラスは、結晶のような長距離周期性を持たないまま固化した合金であり、優れた機械的・磁気的特性等を示すことから、基礎・応用の両面で注目されてきている。特に、液体合金を急冷して結晶化を回避することでガラスが形成され、合金組成によってそのガラス化し易さが異なるという実験事実があり、その物理的起源についてはこれまで多くの議論がなされてきた。ガラス化し易さは一般にガラス形成能 (glass-forming ability, GFA) として評価され、大きなバルク金属ガラスを作製できる組成ほど、学術的にも工業的にも重要となる。

本研究では二元系の中でも比較的高いガラス形成能を示す代表的な系であるCu-Zr系金属ガラスに着目する。本合金系では、広い組成範囲でガラス単相を得ることが可能である。その中でもCu₆₄Zr₃₆は、特に高いガラス形成能を持つ組成として知られており、本研究でもこの組成における局所構造の特異性に注目している。実際、この高いガラス形成能は、単なる平均組成だけで決まるのではなく、各原子のまわりにどのような局所構造、すなわち短距離秩序が形成されるかと深く関係していると考えられてきた。そのため、Cu-Zr金属ガラスでは、中心原子の周囲に形成される原子クラスターの形や配位環境が、長年にわたり重点的に調べられてきている。

この局所構造解析において広く用いられてきたのが、Voronoi (ボロノイ) 多面体解析である。この方法では、各原子の周囲をVoronoi指数で分類することにより、どのような配位多面体が多いかを整理できる。Cu-Zr系では、 $\langle 00120 \rangle$ で示される20面体原子クラスターが重要な短距離秩序として知られており、特にCu₆₄Zr₃₆付近でその割合が高いことが報告されている。したがって、20面体的な局所構造は、この系のガラス形成を理解する上で重要であると思われる。

Voronoi指数は局所構造の分類には有効である一方で、ガラス中に必然的に存在する歪みや揺らぎ、あるいは似ているが完全には同一ではないクラスター同士の連続的な違いを表現するのは得意ではなく、全体的な形の特徴は捉えにくい。そのため、金属ガラスの局所構造をより適切に記述するには、配位多面体のラベル付けを超えた新しい見方が必要になる。そこで本研究で導入されたのが、計算トポロジの手法であるパーシステント・ホモロジーである。これは点配置データに潜む連結性や穴、空洞といったトポロジ的な特徴を抽出する方法であり、近年ではガラスやアモルファス物質の構造解析にも応用されてきた。我々は2010年頃からこの手法に着目し、これまでに、金属ガラス中の原子クラスターに対して0次のパーシステント・ホモロジーを適用し、トポロジ的秩序の存在を示している。また、構造全体に対して1次・2次のパーシステント・ホモロジーを用いることで、ガラスの短距離秩序から中距離秩序に関わる特徴も調べてきた。

しかし、金属ガラス中の個々の原子クラスターそのものが持つ高次のトポロジ的特徴を明確に捉えるには、構造全体を一括して解析するだけでは不十分である。必要なのは、各原子の第一近接殻を一つ一つ取り出し、そのクラスター内部に現れる空洞の生成と消滅を調べることであ

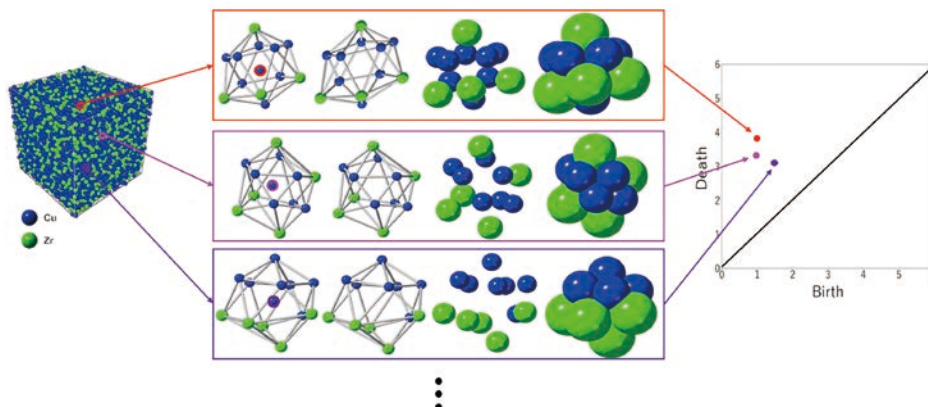


図1. クラスターホモロジー解析のプロセス。分子動力学法により得られた構造モデルのすべてのCuあるいはZr原子の周辺構造を抽出して逐一ホモロジー解析を行う。得られたBirth, Deathのペアはパーシステンス図にプロットしている[1]。

る。そこで本研究では、個々の原子クラスターに対して第2パーシステンス図 (PD2) を求めるクラスター・ホモロジー解析を行い、金属ガラスに特有なトポロジ的短距離秩序を抽出することを目指した。

[計算方法]

構造モデルは、古典分子動力学計算により作成された。 $\text{Cu}_{64}\text{Zr}_{36}$ 組成、総原子数13,500個のモデルを2000 Kの液体状態で平衡化したのち、 1.0×10^{11} K/sの冷却速度で300 Kまで冷却し、ガラス状態を得ている。相互作用にはEAMポテンシャルを用い、NPTアンサンブルのもとで計算を行った。

クラスター・ホモロジー解析の概要は図1に示している。まず中心原子のまわりの第一近接殻を、部分二体分布関数 $g(r)$ の第1ピークと第2ピークの谷を基準にして抽出する。 Cu-Cu 、 Cu-Zr 、および Zr-Zr の各原子対に対し、それぞれ適切なカットオフ距離を設定し、第一殻に属する原子群を定義する。その後、中心原子を除いた周囲原子に対して球を置き、半径を徐々に増加させながら、クラスター内の空洞がいつ生まれ、いつ消えるかを追跡する。空洞が生じる半径の二乗をBirth、消える半径の二乗をDeathとし、それらを二次元ヒストグラムとしてまとめたものが2次のパーシステンス図 (PD2) である。

このPD2において、各点は一つの原子クラスターに対応し、分布が狭く集中していれば、それだけクラスター形状に強い秩序があると解釈できる。本研究では、分布のまとまり具合を表す指標としてBirthとDeathの共分散も評価しており、これをトポロジ的秩序の強さの定量化に用いている。

[結果および考察]

分子動力学計算で得た構造モデルの妥当性を確かめるため、計算で得たX線構造因子を従来の散乱実験結果と比較し、少なくとも主要な第1・第2ピークについて良い一致が得られている。また、部分二体分布関数も、各原子対に対する第一近接距離を適切に与えており、以後のクラスター抽出の妥当性が確認されている。さらに、従来の手法であるVoronoi多面体解析から、Cu中心クラスターでは<00120>型、すなわち20面体的な局所構造が比較的多く現れることが再確認された。

しかし本研究の重要な点は、ここで議論を終えず、クラスターのトポロジ的秩序についてPD2を通じて見ることにある。そこで、まずCu中心クラスターとZr中心クラスターのPD2を比較したところ、Cu中心クラスターの方がより狭い範囲に集中しており、強いトポロジ的秩序を持つことが示唆された。これは、単に20面体が多いというだけでなく、Cu周辺の原子クラスターが、ガラス特有のある共通したトポロジ的な特徴を持っていることを意味している。

さらに図2に示すように、Cu中心クラスターを配位数CN=11, 12, および13に分けてPD2を比較している。通

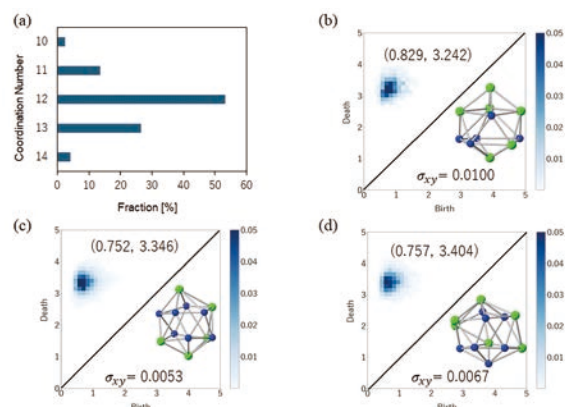


図2. Cu中心クラスターに対する (a) 配位数の分布と、(b) 11配位 (c) 12配位、および (d) 13配位クラスターに対するクラスターホモロジー解析結果 (PD2) [1]。

常はCN=12、特に20面体クラスターが特別視されやすいが、本研究ではCN=11~13のPD2分布が大きくは変わらないことが示された。すなわち、ガラス中ではCN=12の20面体だけが孤立して特別な存在なのではなく、CN=11や13の近縁な局所構造も含めて、連続的なトポロジ的秩序を形成しているのである。これは、Voronoi指数だけでは見えにくい重要な知見であり、従来の極度に20面体のみに着目する見方を超えて、ガラスの局所構造をより滑らかな分布として捉える必要性を示している。

[結 言]

本研究は、金属ガラスの局所構造をVoronoi多面体の分類としてではなく、トポロジ的な形の分布として捉え直した点に意義がある。我々の提案するクラスター・ホモロジー解析により、Cu-Zr金属ガラス中の原子クラスターは、本稿では示していないが、結晶中のクラスターや理想的な正20面体とは異なる、ガラス特有のトポロジ的短距離秩序を持つことが示された[1]。

特に重要なのは、Cu中心クラスターのPD2が高い集中性を示し、しかもその特徴が配位数11~13の間で大きく変わらないことである。これは、ガラス構造を構成する秩序が、単一の理想クラスターによって担われているのではなく、類似した複数の局所構造がまとまりとして形成する秩序であることを示唆している。金属ガラスの本質は、結晶のような厳密な規則性ではなく、ある幅を持ちながらも強く集中したトポロジ的秩序にある、ということもできる。このような視点は、Cu-Zr系に限らず、化学的秩序が比較的弱い多くの金属-金属型ガラスにも適用可能と考えられる。今後、こうしたトポロジ的秩序と力学特性、ガラス形成能、あるいは緩和現象との関係が明らかになれば、金属ガラス研究に新たな構造の見方を与えることになることが期待される。結果の詳細に関しては文献[1]を参照。

[参考文献]

[1] Y. Satomi and A. Hirata, Next Res., 2, 100713 (2025).

細井厚志研究室

超音波疲労試験における擬似等方CFRP積層板の疲労損傷に及ぼす自己発熱の影響

1. 緒 言

近年、炭素繊維強化プラスチック（CFRP）は風力タービンブレードといった 10^8 サイクル以上の繰り返し負荷が加わる部材に適用が進んでいる。このような 10^8 サイクル以上の繰り返し負荷が加わる領域は超高サイクル域と呼ばれる。この超高サイクル域における疲労特性を調べるために、金属材料ではアルミニウムや鋼材などを対象として試験周波数 $f=20$ kHzで疲労試験を行うことのできる超音波疲労試験機が使用されており、大幅に試験時間を短縮できる。この超音波疲労試験機のCFRPへの適用は三点曲げ試験から始まったが、試験片端部に最大の変位、中心領域に最小の変位が生じるような形状の試験片を設計することで、軸方向荷重下での疲労試験も可能になっている。しかし、複合材を構成する樹脂は金属と比べて熱伝導率が低く、粘弾性特性も大きく影響する。よって、高速で負荷と除荷を繰り返す超音波疲労試験では、試験片に過度の温度上昇が生じる。この温度上昇の対策として、空冷と間欠運転（負荷を加えた後、に一定の休止間隔を設けるプロセスを繰り返す負荷方法）が活用されているが、これらの対策によっても自己発熱に起因する温度上昇を完全に抑えることはできない。

超音波疲労試験と油圧疲労試験で取得した疲労寿命を比較した研究においては、油圧疲労試験の結果から得られた近似曲線と超音波疲労試験の結果が一致すると報告している例もあれば、一致しないと報告している例もあり、超音波疲労試験と油圧疲労試験の結果に差異が存在するかについてははまだ未解明である。

超音波疲労試験と油圧疲労試験の大きな違いとして、試験周波数及び自己発熱による温度上昇が挙げられる。超音波疲労試験と油圧疲労試験結果の差異がある場合、これらの試験方法による条件の差異がその要因となっている可能性がある。よって、自己発熱による温度上昇が損傷の累積に与える影響を詳しく調べる必要がある。また、CFRP試験片の側面や破断面の観察を行うデジタルマイクロスコブや電子顕微鏡では、CFRPの損傷の発生から進展までを三次元的に計測することが難しい。このため、本研究ではX線CTを用いてクラックの観察を行う。さらに、超音波疲労試験と温度環境下での油圧疲労試験において損傷を同一の評価手法で評価し、整理することにより、損傷の累積に対して自己発熱による温度上昇が与える影響を明らかにする。

2. 試験方法及び試験方法・評価方法

2.1 材料系 本研究では、T800S/#3900-2B層間強化プリプレグから成形した擬似等方CFRP積層板（ $[-45/0/45/90]_s$ ）

を用いて疲労試験を実施した。各層の厚さは0.191 mmである。繊維体積含有率 V_f は56 %である。

2.2 油圧疲労試験 室温（RT）と50℃での損傷累積の観察と評価を目的として、油圧疲労試験機を用いて疲労試験を行った。油圧疲労試験片の寸法は図1に示す。タブとして $\pm 45^\circ$ 層のGFRP積層板を使用した。疲労試験を行う前に加工傷を研磨で取り除いた。試験条件は試験周波数 $f=5$ Hz、応力比は $R=-1$ とした。恒温槽付疲労試験機を用いることで超音波疲労試験の自己発熱を模擬した50℃の環境下で試験を行った。各温度条件における試験片は2本とし、 $\sigma_{\max}=250$ MPa、200 MPaのそれぞれで2本ずつ試験を行った。1, 2, 5×10^6 サイクル（ $n=1, 2, 3, \dots$ ）で試験を停止し、X線CTを用いてクラック進展の観察を行った。

2.3 超音波疲労試験 ギガサイクル域までの損傷進展の観察と評価を目的として超音波疲労試験を実施した。超音波疲労試験片の形状を図2に示す。タブにはアルミニウム合金A2017が使用された。この超音波疲労試験片の形状は周波数約20 kHzにおいて縦振動一次モードで共振するように有限要素法を用いて設計した。試験片中心部の10 mmの区間でひずみと応力が一定となっているため、この区間において油圧疲労試験結果と比較可能である。試験条件は応力比 $R=-1$ 、周波数 $f=20$ kHzで設定した。試験片の過度な温度上昇を防ぐため、空冷と間欠運転を行った。間欠運転では、負荷過程を150 ms、休止過程を3000 msと設定する。試験片の温度測定には赤外線サーモグラフィカメラを使用した。1, 2, 5×10^6 サイクル（ $n=4, 5, 6, 7, \dots$ ）で試験を停止しX線CTを用いてクラックの観察を行った。

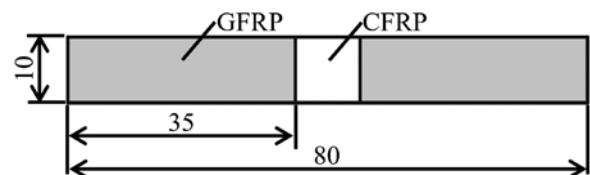


Fig. 1 CFRP specimen geometry for hydraulic fatigue test (unit: mm).

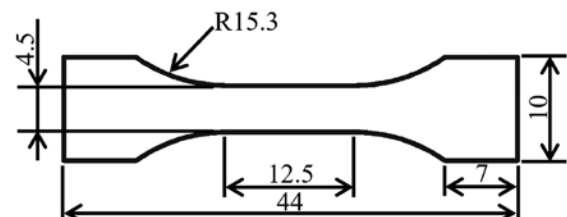


Fig. 2 CFRP specimen geometry for ultrasonic fatigue test (unit: mm).

2. 4 X線CTでの損傷評価 擬似等方CFRP積層板の各層における損傷の発生から進展までを三次元的に観察、評価するためにX線CTを用いた。X線CTでの油圧疲労試験片の観察画像は図3に示す。X線CT画像から観察可能なトランスバースクラックの総数を n_{90° と定義した。また、評点間距離を L とし、トランスバースクラック密度を算出した。

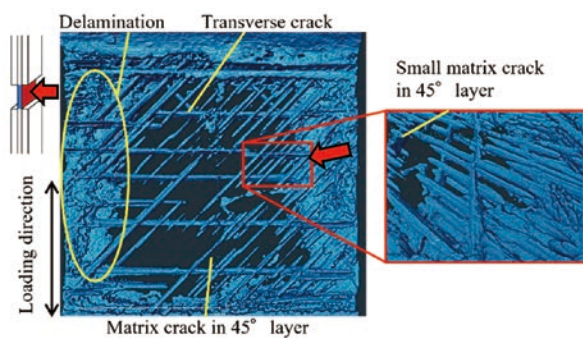


Fig. 3 Observation of Test Specimens for Hydraulic Fatigue Testing Using X-ray CT.

3. 試験結果・考察

超音波疲労試験と油圧疲労試験におけるクラック密度の成長挙動を同一の指標で比較するために、シアラグ解析に基づいて最大エネルギー解放率を算出した。トランスバースクラック密度が $D_{90^\circ, k}$ から $D_{90^\circ, k+1}$ に変化した際の最大エネルギー解放率 $G_{\max}$ を熱残留応力を考慮して求めた。これにより、油圧疲労試験 (RT, 50 °C) と超音波疲労試験の結果を、同一指標を用いて整理することが可能となる。観察を行った各サイクルにおけるクラック密度からクラック密度成長速度 (dD/dN) を求め、修正Paris則を用いて評価した。特に90°層のトランスバースクラック密度の成長速度を図4にまとめた。油圧疲労試験におけるRTと50 °C条件の差は、熱残留応力の違いとして $G_{\max}$ に反映した。

図4より、250 MPaの油圧疲労試験でのRT条件と50 °C条件の結果を比較すると、トランスバースクラック密度が低く、最大エネルギー解放率が高い領域では、RT条件と50 °C条件の結果は近い値をとる。一方で、クラック密度の増加に伴い、最大エネルギー解放率 $G_{\max}$ が減少していくと、同一の最大エネルギー解放率 $G_{\max}$ に対する50 °Cのトランスバースクラック密度増加速度 dD/dN はRT条件の結果よりも低くなる傾向が確認できる。全体としては、50 °C条件の近似曲線は、RT条件よりもやや下方に位置している。この要因としては、温度上昇に伴う材料の靱性の向上が考えられる。トランスバースクラック密度の増加によりクラック間隔が狭くなると、隣接クラック間で応力が十分に回復しなくなるため、最大エネルギー解放率は減少する。その結果、クラック密度が上昇するにつれて、この

温度上昇による材料の靱性向上の影響が相対的に大きくなると考えられる。さらに、トランスバースクラックの増加はクラック周辺の局所的な温度上昇が生じる領域の拡大を招く。このように温度上昇の影響を受ける領域が材料内部で広がることで、さらなる靱性向上に寄与している可能性が示唆される。

180 MPaでの超音波疲労試験の結果では、トランスバースクラックの増加に伴って最大エネルギー解放率 $G_{\max}$ が減少していくと、ある段階で dD/dN が急激に小さくなり、250 MPaの油圧疲労試験結果 (RT, 50 °C) の近似曲線よりも下方にプロットされる。このように急速に dD/dN が小さくなるのは、トランスバースクラック数が増加して、クラック数がほとんど増加しなくなる飽和領域へ遷移しつつある影響などが考えられる。

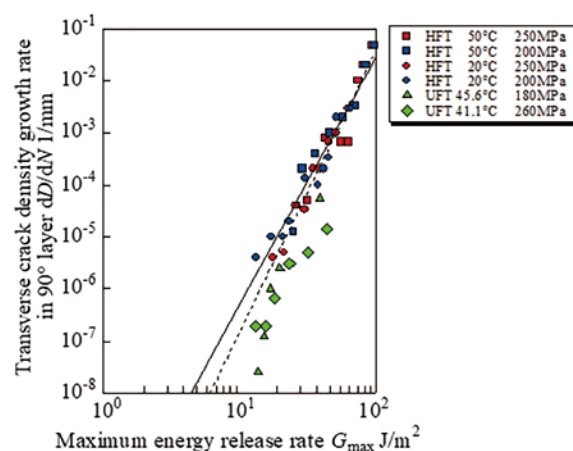


Fig. 4 Relationship between transverse crack density growth rate in 90° layers and maximum energy release rate.

4. 結 言

本研究では、擬似等方CFRP積層板に対してRT及び50 °C環境下で油圧疲労試験及び超音波疲労試験を実施し、X線CTによりクラックを観察するとともに、各層のクラック密度を評価した。さらに、各層の損傷状態と熱残留応力による影響を考慮したエネルギー解放率をシアラグ解析によって算出し、クラック密度の増加速度と最大エネルギー解放率の関係として整理することで、温度上昇や試験条件が疲労損傷累積に与える影響を検討した。250 MPaの油圧疲労試験の結果に基づく、RTよりも50 °C条件の方が90°層のトランスバースクラックの累積が抑制される傾向が見られ、温度上昇による材料の靱性の向上の影響が示唆された。よって、高い試験周波数に起因する自己発熱により試験片内部の温度上昇が生じる超音波疲労試験を用いた損傷評価においては、熱残留応力の影響を含めた材料の温度依存性を考慮することが必須である。

スパッタ法のガス比による AlN 薄膜の極性制御と高次モード分極反転音響共振子

1. 研究背景

近年、分極反転構造を有する AlN エピタキシャル薄膜が、10 GHz を超える BAW フィルタ応用に有望視されている[1]。単層圧電膜は基本モード、 n 層の分極反転構造では n 次モードで共振する。同一の共振周波数で動作させる場合、分極反転 n 層構造の膜厚は単層の n 倍となり、インピーダンス整合を考慮すると電極面積も n 倍、体積は n^2 倍となる[2]。これにより熱損傷による BAW フィルタの故障を抑制できる。分極反転構造の作製には、Al 極性と N 極性の AlN 薄膜を交互に積層する必要がある。AlN は通常、スパッタ法では Al 極性で成長し、N 極性の成長には、特別な処置が必要であり、連続成長や大面積成長が難しいものも少なくない[2-8]。そこで本研究では、より簡便に真空を破らずに連続的に AlN 薄膜の成長極性を制御する方法として、RF マグネトロンスパッタリング法におけるガス比の制御を検討し、十層分極反転 AlN 薄膜の作製を行った。

2. ガス比による AlN 薄膜の極性制御

RF マグネトロンスパッタ法を用い、(111) Pt/ブラッグ反射器/Si 基板上に、(0001) AlN (580 nm および 520 nm) をスパッタガス比 (Ar/N_2) を変化させて 1 層ずつ成膜した。 $\text{Ar}/\text{N}_2 = 4$ の条件は、これまでの我々の研究において AlN 薄膜の成長に最も頻繁に用いられ、Al 極性成長が得られることが確認されている。本研究ではこれに加え、 $\text{N}_2 = 100\%$ 雰囲気下での成長実験を行い、比較を行った。

まず、X 線回折装置 (X'Pert PRO, PANalytical) を用いて、AlN 薄膜の結晶性を評価した。 36° 付近に AlN 薄膜の (0001) 面のピークが出現したことから、 $\text{Ar}/\text{N}_2 = 4$ と $\text{N}_2 = 100\%$ とともに AlN 薄膜が結晶化していることがわかる。

次に AlN 薄膜の極性を評価した。圧電薄膜に直流電圧

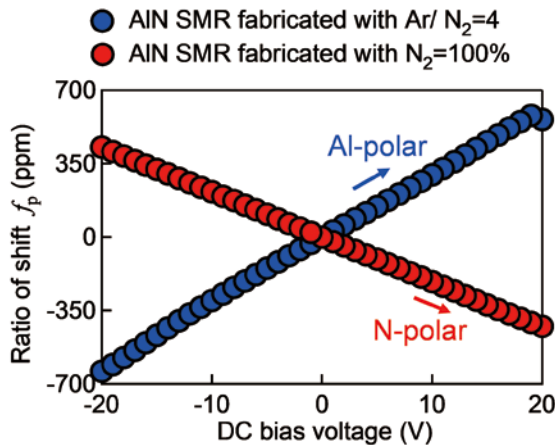


図1 ガス比 $\text{Ar}/\text{N}_2 = 4$ および $\text{N}_2 = 100\%$ で成長させた AlN SMR の直流電圧印加時の反共振周波数の変化率

を印加すると反共振周波数 f_p がシフトすることが知られており[9]、そのシフト方向から極性を判定できる。そこで、 $\text{Ar}/\text{N}_2 = 4$ および $\text{N}_2 = 100\%$ の条件で成長させた AlN 薄膜の f_p シフト方向を調べた。図1に示すように、 $\text{Ar}/\text{N}_2 = 4$ 雰囲気下で作製した AlN 薄膜と、 $\text{N}_2 = 100\%$ 雰囲気下で作製した AlN 薄膜では、 f_p のシフト方向が逆であった。このシフト方向の違いから、 $\text{Ar}/\text{N}_2 = 4$ では通常の Al 極性成長が、 $\text{N}_2 = 100\%$ では異常な N 極性成長が生じていることがわかる。

3. 三層分極反転 AlN 薄膜の作製と評価

基板に依存せずに (111) Pt/サファイア単結晶基板에서도 AlN 薄膜の極性が制御できるか、さらにガス比の極性制御によって三層分極反転 AlN 薄膜が作製できるかを調べた。RF マグネトロンスパッタ法を用いて、(111) Pt/サファイア基板上に三層の AlN 薄膜を作製した。一層目および三層目は $\text{N}_2 = 100\%$ 雰囲気下で、二層目は $\text{Ar}/\text{N}_2 = 4$ 雰囲気下で成膜を行った。一層目作製後に 2θ - ω 走査 XRD パターンを行い、 36° 付近にピークが現れたことから、サファイア単結晶基板上における $\text{N}_2 = 100\%$ 雰囲気下での成膜でも、AlN 薄膜が結晶化したことがわかる。三層積層後に測定した (10 $\bar{1}$ 1) AlN の極点図が六回対称を示すことから、一層目、二層目、三層目共に AlN が下地の結晶構造を引き継いでエピタキシャル成長したことが確認できた。

次に、直流バイアス印加時の反共振周波数 f_p のシフト方向により、AlN 薄膜の極性を調べた。図2に示すバイアス測定結果から、 $\text{N}_2 = 100\%$ 雰囲気下で作製した AlN 薄膜/Pt/ Al_2O_3 基板付き共振子の多重共振の反共振周波数 f_p は、電圧を上げていくと右肩下がりに減少していった。このことより、エピタキシャル成長の AlN 薄膜であっても、 $\text{N}_2 = 100\%$ 雰囲気下では N 極性成長することがわかる。

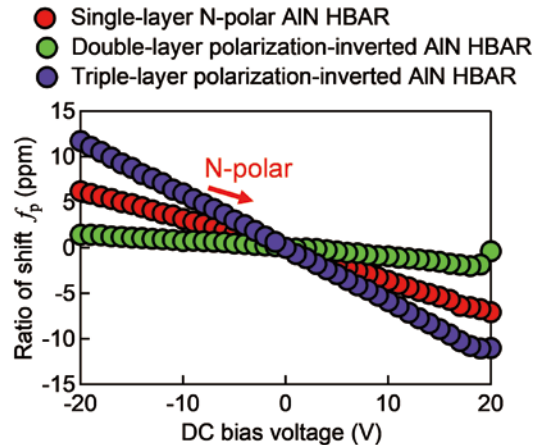


図2 三層分極反転 AlN 薄膜/Pt/ Al_2O_3 HBAR の直流電圧印加時の反共振周波数の変化率

また、ネットワークアナライザ (E5071C, Agilent Technologies) を用いて測定した、三層分極反転AlN薄膜の基板付き共振子の変換損失を図3に示す。

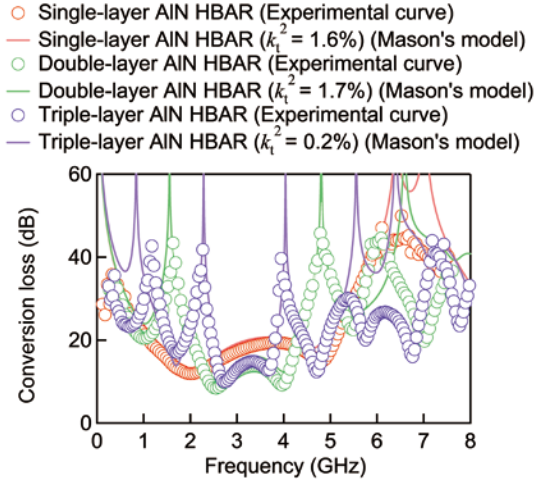


図3 三層分極反転AlN薄膜/Pt/Al₂O₃ HBARの変換損失

一層目AlN薄膜のみの変換損失曲線では、2.0 GHzで基本モード共振、二層分極反転AlN薄膜の変換損失曲線では2.5 GHzで二次モード共振しており、基本モードは抑制されている。三層分極反転AlN薄膜の変換損失曲線では2.7 GHzで三次モード共振しており、基本モード、二次モードは抑制されている。分極反転構造が作製できていることが確認できる。Masonの等価回路と比較すると、一層目AlN薄膜は電気機械結合係数 $k_t^2 = 1.6\%$ 、二層分極反転AlN薄膜では $k_t^2 = 1.7\%$ 、三層分極反転AlN薄膜では $k_t^2 = 0.2\%$ と推定され、シミュレーションとよく一致した。

4. 十層AlN薄膜の作製と評価

先述したようにガス比制御によって三層分極反転AlN薄膜の作製に成功した。しかし、積層するごとに大気開放して、金蒸着・変換損失測定・ヨウ素エッチングを行っていた。もし、大気開放なしで連続的に分極反転成長できれば、自動化やプロセス時間短縮も容易になり、何十層などの分極反転実現も視野に入ってくる。三層分極反転AlN薄膜と同様にガス比を調整することでAl極性とN極性を交互に成長させ、十層分極反転AlN薄膜の作製を試みた。

作製した十層分極反転AlN薄膜の基板付き共振子の変換損失を図4に示す。変換損失では、6.6 GHzで最小のディップをもった。また、図4にMasonの等価回路モデルを用いた、理論曲線を示す。このとき、各層の膜厚は、断面SEM画像から得た十層全体の膜厚から、各層の膜厚が全て等しいとして、770 nmとした。また、 $k_t^2 = 1.0\%$ とした。その結果、理論曲線は、6.6 GHzで最小のディップをもった。

実験値と理論曲線ともに他のモードが抑制されて十次のピークが励振されていることから十層分極反転AlN薄膜の作製に成功しているといえる。

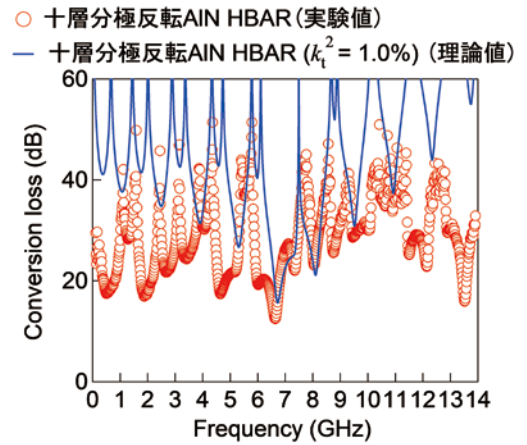


図4 十層分極反転AlN薄膜/Pt/Al₂O₃ HBARの変換損失

参考文献

- [1] Izhar, et al., *IEEE EDL*, (2023).
- [2] M. Suzuki, et al., *APL*, **104**, 172905, (2014).
- [3] J. D. Larson III, et al., *Proc. IEEE Ultrason. Symp.*, (2010).
- [4] E. Milyutin, et al., *J. Vac. Sci. Technol. B*, **28**, (2010).
- [5] T. Harumoto, et al., *J. Appl. Phys.*, **113**, (2013).
- [6] J. Skimoto, et al., *APL*, **121**, 141904, (2022).
- [7] Izhar, et al., *IEEE Electron Device Lett.*, **44**, (2023).
- [8] 鈴木菜々海, et al., 第72回応用物理学会春季学術講演会, (2025).
- [9] T. Soutome, and T. Yanagitani, *Proc. IEEE Ultrason. Symp.*, (2019).

山口勉功研究室

FeO_x-CaO-SiO₂系スラグと溶鉄間の白金とパラジウムの分配挙動

1. はじめに

近年、脱炭素社会に向けてHV (Hybrid Vehicle: ハイブリッド車) を含む乗用車の電動化が加速している。HVはガソリン車に比べて小型であるがエンジンを搭載しており、白金、パラジウム、ロジウムの白金族金属 (Platinum Group Metals: 以降PGMと略称する) を使用した自動車排気ガス浄化触媒 (以降自動車触媒と略称する) を搭載している。HVはバッテリー駆動とエンジン駆動が頻繁に切り換わる。エンジンの始動時は自動車触媒の負荷が高くなることが知られており、HVの触媒にはガソリン車よりも多くのPGMが使用されている。排気ガス浄化の触媒として用いられているPGMは希少性や偏在性が高く、国際的な需要増大へ対応するためにはリサイクルが不可欠となっている。

自動車触媒はコーディエライト (酸化物) を主成分とした構造体に白金、パラジウム、ロジウムなどを担持したものであり、現在、そのリサイクル手法の一つとして、図1の溶鉄を用いたプロセスが報告されている¹⁾。このプロセスにおいて、電気炉製錬の後工程として、酸化炉を用いてFe-PGM系合金のFeを酸化してFeO系スラグにするとともに、Fe-PGM系合金中のPGM濃度を高くする場合がある。そこで本研究では酸化炉製錬におけるPGMを溶鉄中に濃縮する上で重要な1873 KにおけるFeO_x-CaO-SiO₂系スラグと溶鉄間の白金の分配挙動を明らかにすることを試みている。

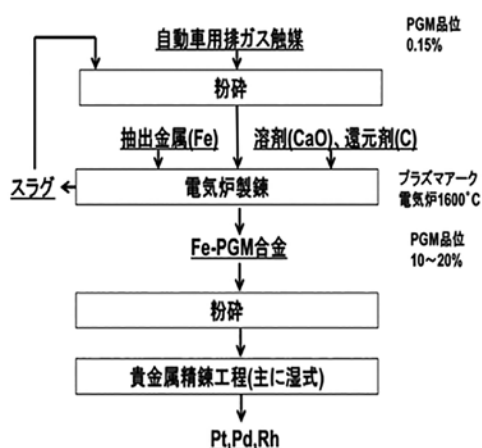


図1 溶鉄を用いたPGM回収フロー¹⁾

2. 実験方法

本実験では鉄合金中のPtまたはPd濃度を20 mass%とし、FeO系スラグと平衡させた。2 gの鉄合金と7 gのFeO_x-CaO-SiO₂系スラグをMgOるつばに挿入し、アルゴンガス置換後、1873 Kで2時間、溶融保持する。その後、試料を炉内から取り出し、アルゴンガス吹きつけで急冷した。メタルおよびスラグ相を分離した後、スラグ相とFe-

PGM合金相の成分濃度をICP-OESで、スラグ相中のSiO₂濃度を重量法で決定した。

3. 実験結果および考察

1873 Kで5 mass%SiO₂-CaO-FeO_x系スラグと20 mass%X-Fe (X: Pt, Pd) を平衡し、スラグと溶鉄間のXの分配について調べた。本実験では、スラグと溶鉄間の元素Xの分配比を次式により定義する。

$$L_X^{\text{Slag/Fe}} = \frac{(\text{mass\% } X \text{ in slag})}{[\text{mass\% } X \text{ in Fe}]} \quad (X: \text{Pt, Pd}) \quad (1)$$

図2に本実験で決定されたスラグと溶鉄間のPtの分配比とスラグ組成の関係を、図3に本実験で決定されたスラグと溶鉄間のPdの分配比とスラグ組成の関係を示す。

図2のPtの分配実験において、FeO単独のスラグを用いたとき、黒枠の白丸と黒丸は0.1前後の同程度であり、粉末状のFeとPt試料を用いた場合とFe-Pt系母合金を用いた場合で分配比に差はほぼ無いと考える。

またCaOおよびSiO₂を含まないFeO単独のスラグを用いたときの分配比は、図2よりPtが0.1、図3よりPdが0.03と大きな値を示し、PtとPdのFeO系スラグへのロスが多いことがわかる。しかしながら、CaO-FeO_x系スラグを用いた場合、図に示されるように分配比はスラグ中のCaO濃度が増加すると小さくなる傾向を示す。青の三角はスラグ中のSiO₂濃度を5 mass%に固定した場合のFeO_x-CaO-SiO₂系スラグを用いた結果を示す。CaOを含まない5 mass%SiO₂-FeO_x系スラグと溶鉄間のPtとPdの分配比は0.01程度とスラグロスが多い。しかしFeO単独のスラグを用いた場合よりは分配比が小さく、スラグへのPGMロスは小さくなる。

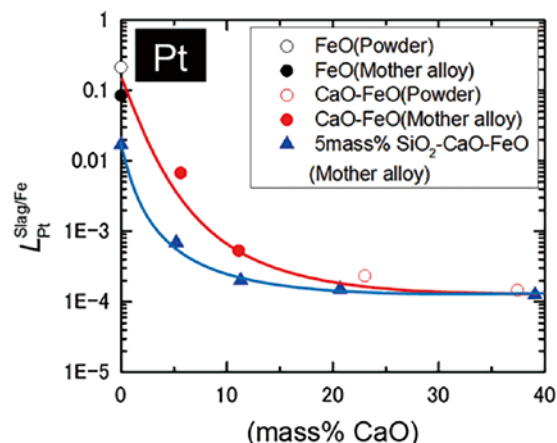


図2 FeO_x-CaO-SiO₂系スラグと溶鉄間のPtの分配比とスラグ組成の関係

CaOを10 mass%程度含んだ5 mass%SiO₂-CaO-FeO_x系スラグの分配比は、Ptが 2×10^{-4} 、Pdが 2×10^{-3} 程度を示し、10 mass%程度のCaOをFeOスラグに添加すれば、スラグロスは低減できることがわかった。また10 mass%CaOにおいては、CaO-FeO_x系スラグと比較しても5 mass%SiO₂-CaO-FeO_x系スラグの方が分配比は低くなる。さらにPtとPdについて比較すると、スラグ中のCaO濃度が増加したとき、同じスラグ組成において、Pdの分配比はPtに比べて大きくなる傾向を示した。

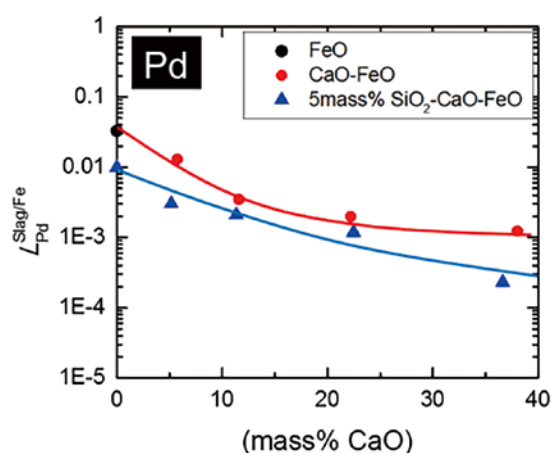


図3 FeO_x-CaO-SiO₂系スラグと溶鉄間のPdの分配比とスラグ組成の関係

20 mass%Pt-Fe合金と平衡させた5 mass%SiO₂-FeO_x系スラグのEPMA分析による反射電子像を図4に示す。観察の結果、スラグ相中には白金を含む金属相を確認した。スラグ相中の白金濃度は1.0 mass%Ptであり、平衡するFe-Pt合金の20 mass%のPt濃度に比べて低い。したがって、白金のスラグロスの原因は共存する20 mass%Pt-Fe系合金の物理的な懸垂ではなく、化学的な溶解していたものが冷却過程で析出したものと考えられる。

図5に5 mass%SiO₂-FeO_x系スラグ相についてのBSE像と特性X線像を示す。スラグ中の鉄はスラグが溶融していた際に懸垂していたものなのか、冷却過程で析出したものかは定かではないが、Fe中のPt濃度は平衡するFe-Pt系合金のPt濃度に比べて低くなっている。Fe-O系状態図によるとFe(l)と平衡するFeO(l)の酸素濃度は冷却に伴い大きくなり、系外から酸素が供給されない場合は、FeO系スラグにFe(l)やFe(s)がスラグ中に生成される²⁾。スラグ中のFe-Pt系合金が冷却過程に析出したものと考えれば、スラグ中のFe系合金は、高温ではスラグとして存在していたことを予想させる。

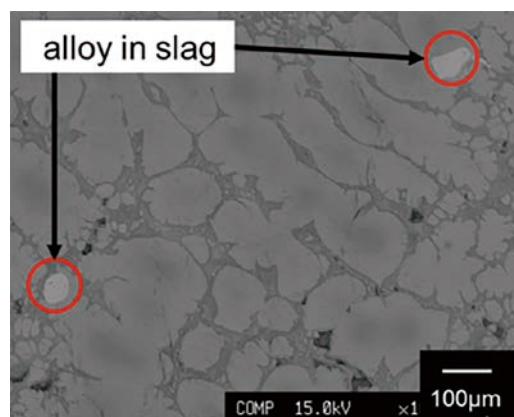


図4 5 mass%SiO₂-FeO_x系スラグ相の冷却後組織の反射電子像

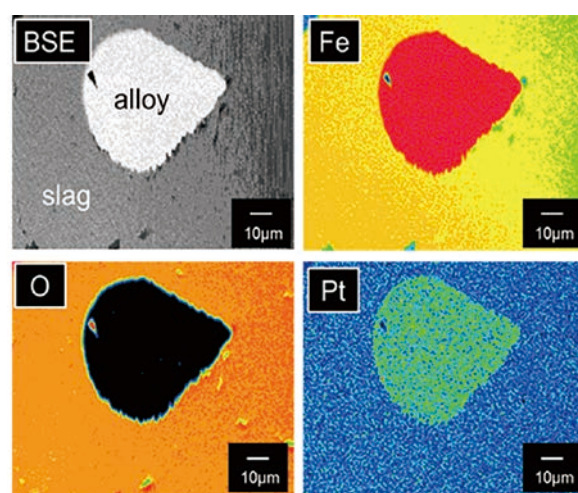


図5 5 mass%SiO₂-FeO_x系スラグ相についてのBSE像と特性X線像

4. おわりに

CaOを含まない5 mass%SiO₂-FeO_x系スラグと溶鉄間のPtとPdの分配比は0.01程度でPGMのスラグロスは多い。しかし、CaOを10 mass%程度含んだ5 mass%SiO₂-CaO-FeO_x系スラグを用いることで、PtとPdの分配比は、Ptが 2×10^{-4} 、Pdが 2×10^{-3} 程度に小さくなり、スラグロスを低減できることがわかった。

参考文献

- 1) 岡部徹ら: レアメタルの最新動向, シーエムシー出版, (2012), p.205
- 2) A. Muan, Am. Ceram. Soc. Bull., 37 (1958), pp.81-84

山本知之研究室

環境整合材料基盤技術共同研究拠点における主要な共同研究テーマである、省エネルギーと長寿命化を目指した環境整合材料に関する研究を中心に、2025年度においては、3つの研究テーマ、1) 機械学習を用いた材料物性予測、2) ペロブスカイト太陽電池の光吸収層材料の開発、3) 希土類フリー赤色蛍光体の発光メカニズム、に関する国際共同研究を進めた。以下に、本年度の成果概要の一部について、それぞれ記す。

1) 機械学習を用いた材料物性予測

本年度は、これまでに進めてきた次世代の構造材料として注目される高エントロピー合金 (HEA) の機械的特性を対象とした機械学習に関する研究を更に発展させて、因果推論 (Causal Inference) を用いた研究を進めた。以下にその成果の一部として発表した論文[1]の概要を示す。

HEAの機械的特性の推定において、特定の元素濃度の変化が降伏応力に与える影響を、因果推論という新しいデータサイエンスの手法を用いて定量的に解明した。HEAは5種類以上の主要元素から構成される複雑な系であり、その膨大な組成の組み合わせの中から望ましい機械的特性を持つ材料を見つけ出すことは、従来の実験的手法や相関関係に依存する標準的な機械学習では限界があった。

これまでの材料科学における機械学習の活用は、主に「予測」に主眼が置かれてきた。しかし、高精度な予測モデルであっても、どの因子が結果に直接寄与しているのかという「因果関係」を明らかにすることは困難であった。例えば、ある元素を増やしたときに強度が上がったとしても、それがその元素自体の効果なのか、あるいは他の物理量の変化を介した間接的な影響なのかを切り分けることが材料設計には不可欠である。本研究では、この課題を解決するために、構造的因果モデル (SCM) と「Double/Debiased Machine Learning (DoubleML)」を導入した。

まず、HEAの特性を記述するための因果モデル「HEACML」を構築した。このモデルは、原子濃度の変化が価電子濃度 (VEC)、混合エンタルピー (ΔH_{mix})、混合エントロピー (ΔS_{mix}) といった物理的な記述子に影響を及ぼし、最終的に降伏強度が決定されるという因果経路を定義したものである。これにより、特定の元素を「介入 (操作)」した際に、複雑に絡み合う他の変数の影響 (交絡) を統計的に排除し、純粋な効果のみを抽出することが可能になった。

因果効果の推定には、DoubleMLというフレームワークを使用した。これは、機械学習を用いてデータ内のバイアスを取り除きながら因果パラメータを推定する手法である。解析では、一般化線形モデル (GLM)、ランダムフォレスト (RF)、サポートベクターマシン (SVM)、勾配ブースティング (XGB) という4つの異なるアルゴリズムを採用し、その精度と信頼性を比較した。

結果として、合金設計において極めて重要な定量的知見が得られた。具体的には、VECが1単位増加すると降伏応力は平均で252.3 MPa減少し、 ΔH_{mix} が1単位増加すると平均29.8 MPa減少することが示された。一方で、 ΔS_{mix} の1単位増加は降伏応力を平均217.4 MPa向上させるという強い正の効果が確認された。特に、4つの手法の中でXGBを用いたモデルが最も狭い信頼区間を示し、物理的な因果関係を最も安定して捉えられることが明らかになった。

本研究の意義は、材料探索のプロセスを「相関」から「因果」へと進化させた点にあり、このアプローチにより、研究者は「なぜこの強度が現れるのか」という物理的な理由に基づき、特定の元素を戦略的に増減させるための具体的な設計指針を得ることができるようになる。これは、試行錯誤の回数を劇的に減らし、過酷な環境に耐えうる高性能な新材料の開発を大幅に加速させる可能性を秘めている。本研究により、因果推論を材料科学に統合することで、ブラックボックス化しがちな機械学習モデルに透明性と解釈性を与えた。この手法はHEAのみならず、多様な複雑合金や機能性材料の設計にも応用可能であり、データ駆動型の材料開発 (マテリアルズ。インフォマティクス) における新たなスタンダードを提示した。今後は、さらに微視的な構造因子をモデルに組み込むことで、より精緻な材料操作が可能になると期待できる。

2) ペロブスカイト太陽電池の光吸収層材料の開発

ペロブスカイト太陽電池の光吸収層材料の構造安定性、電子状態等に関して、第一原理計算を用いた研究を進めた。ここでは、全無機非鉛光吸収層材料として注目されているCsSnI₃を対象とした成果[2]を示す。

次世代の高効率太陽電池材料として囑望されている非鉛ペロブスカイト化合物CsSnI₃を対象とし、塩素 (Cl) ドープと圧力印加がその電子構造、光学特性、および機械的性質に及ぼす影響を第一原理計算によって包括的に論じた。現在広く普及している鉛系ペロブスカイト太陽電池は、極めて高い光電変換効率を示す一方で、鉛による環境負荷や熱的、化学的安定性の低さが実用化における大きな懸念材料となっている。こうした背景から、毒性のないスズ (Sn) を主成分とするCsSnI₃が代替材料として注目されているが、理想的な光吸収を実現するためのバンドギャップ調整や、デバイスとしての耐久性を担保する機械的安定性の向上が不可欠な課題とされていた。本研究では密度汎関数法 (DFT) を用い、ヨウ素 (I) サイトの一部を塩素で置換したCsSnI_{3-x}Cl_x (x=0, 1, 2, 3) の系について、0から10 GPaまでの静水圧環境下における物理的挙動を詳細に検討した。

電子構造解析からは、塩素のドープ量が増加するに伴

い、格子定数の縮小を主因としてバンドギャップが拡大する傾向が明らかになった。未ドーピングの状態では比較的狭いバンドギャップを持つCsSnI₃に対し、塩素の導入は光吸収特性を精密に制御するための有効な化学的手段となることが示されている。さらに、外部から圧力を印加することで、すべての組成においてバンドギャップが減少し、特定のドーピング量と圧力の条件下では、太陽光スペクトルのエネルギー密度が最も高い領域に対応する1.3から1.5 eV付近へとバンドギャップを最適化できることが判明した。これは、化学的ドーピングと物理的圧縮を組み合わせることで、デバイスの光学応答を自在にチューニングできるという、高効率太陽電池設計のための具体的なロードマップを提示するものである。

光学特性の評価においても、塩素ドーピングによる吸収端のブルーシフトと、圧力印加によるレッドシフトが相補的に作用することが確認された。本系は可視光から近赤外領域にわたって10⁵ cm⁻¹ オーダーという極めて高い吸収係数を維持しており、消衰係数や屈折率、反射率、光伝導度といった諸量の計算結果も、ドーピングと圧力の相乗効果が光電変換効率の最大化に寄与することを理論的に裏付けている。特に、高圧下での屈折率の変化や光伝導度の増大は、キャリアの輸送効率向上を示唆する重要な知見である。

また、実用的なデバイス開発において不可欠な機械的性質の検討では、弾性定数、体積弾性率、せん断弾性率、ヤング率、およびポアソン比を算出することで、結晶構造の安定性と材料の柔軟性を評価している。得られた弾性定数はボルン-フランクの安定性条件をすべて満たしており、高濃度のドーピングや極限的な高圧環境下においても材料が構造的に破綻せず、安定して存在し得ることが証明された。さらに、ブッチ比 (B/G 比) の分析により、本材料系がすべての条件下で延性材料としての特性を保持していることが明らかになった。これは、曲げや衝撃に対して脆性破壊を起こしにくいことを意味しており、将来的なフレキシブルデバイスへの応用や、製造工程における機械的ストレスに対する堅牢性を備えていることを示唆している。

結論として、環境調和型の非鉛ペロブスカイト太陽電池において、塩素ドーピングと圧力制御という二つのアプローチが、光学的なパフォーマンスと機械的な信頼性を同時に最適化するための極めて有効な戦略であることを論理的に導き出した。本研究が示した第一原理計算による予測値は、今後の実験的な材料合成や薄膜成長、ひいてはデバイス構造の最適化における確固たる物理的指針となり、持続可能なエネルギー社会の実現に向けた高効率太陽電池開発を大きく加速させる可能性を示した。

3) 希土類フリー赤色蛍光体の発光メカニズム

希土類フリー赤色蛍光体における発光メカニズムを詳細

に検討することを目的として、Cr³⁺をKMgF₃に添加した物質を対象として、発光エネルギーを精密に評価するため、励起状態を直接扱う Δ SCF法と第一原理計算 (DFT) を組み合わせた新たな手法を提案し、その有効性を検証した。遷移金属を添加した光機能材料の設計において、励起状態のエネルギーや電子相関を正確に記述することは極めて重要だが、従来のDFT計算のみではこれらを適切に扱うことが困難であった。本研究はこの課題に対し、ハバードU補正 (DFT+U) や複数の交換相関汎関数を導入することで、実験値との高い整合性を実現する計算スキームを確立した。

まず、KMgF₃のMgサイトをCr³⁺が置換した際の局所構造を最適化し、添加による格子歪みを解析した。計算には標準的なPBE汎関数に加え、メタGGA汎関数のSCAN、およびハイブリッド汎関数のHSE06を用いた。これらの手法で、基底状態 (⁴A_{2g}) から各励起状態 (⁴T_{2g}, ²E_g) への遷移エネルギーを算出した結果、単純なDFTではエネルギーを大幅に過小評価したが、Uパラメーターによる電子相関の補正を加えることで精度が劇的に向上した。特に、HSE06を用いた Δ SCFアプローチは、計算コストは高いものの実験値を極めて正確に再現し、不純物中心の電子構造記述において極めて強力であることを示した。また、SCAN汎関数にU補正を施した手法も、実用的な計算負荷で高い精度を維持できる有力な選択肢となることが明らかになった。

さらに、状態密度 (DOS) 解析によってCr³⁺の3d軌道とフッ素の2p軌道の結合性を明らかにし、発光特性の物理的背景を理論的に裏付けた。結論として、本研究は Δ SCF法が遷移金属添加材料の光学特性予測に非常に有効であることを実証した。この知見は、実験的な試行錯誤を大幅に削減し、新たな高効率蛍光体や光機能材料の論理的な探索を加速させる重要な指針となるものである。

References

- [1-1] H. C. Nguyen and T. Yamamoto, J. Electron. Mater. 54 (2025) 3663.
- [2-1] A. Burkhonzoda et al., Comput. Codens. Mater. 45 (2025) e01130.
- [3-1] Z. Umar et al., Comput. Codens. Mater. 47 (2026) e01274.

謝 辞

本研究は、早稲田大学材料技術研究所 (環境整合材料基盤技術共同研究拠点) とベトナム国家大学ハノイ校 (ベトナム)、ペオグラード大学 (セルビア)、タジキスタン科学アカデミー (タジキスタン) との共同研究として行われたものである。

ADC6 系合金における Fe 系化合物が凝固割れ感受性に及ぼす影響

1. 緒 言

Al-Mg系ダイカスト合金は非熱処理で使用する。また、本合金へのFe添加が凝固割れ感受性HTS (Hot tearing susceptibility) に与える影響は諸説あり、解明されていない。

本研究では、ADC6 系合金におけるFe量がHTSに及ぼす影響を調査する。HTSは以下のように定義する。

$$HTS = \frac{\text{割れの長さの合計}}{\text{試験片の外周}} \times 100 (\%)$$

Feを変量したADC6 系合金のHTSと半凝固状態での延性を取得する。また、金属間化合物に着目し金属組織を観察することによってFe変量が半凝固状態の延性およびHTSを支配する因子を調査する。

2. 実験方法

2. 1 合金組成とI-beam試験, 半凝固引張試験

Al-4.5Mg-1.0Mn-0.2Si-0.08Ti-0.016Bに対してFe量を0.1 wt%, 0.4 wt%添加した合金を供試材料とした。2合金に対してI-beam試験を行い、HTSを取得した。また、熱電対と高速度カメラによって割れ発生温度も測定した。さらに、半凝固状態における引張試験により延性及び強度を取得した。

2. 2 破面及び金属組織の観察

I-beam試験で得た試験片の破面及び長手方向に切断した研磨面、半凝固引張試験で得た試験片の破面についてSEMを用いて金属間化合物に着目し観察を行った。破面では割れ起点となりうる化合物を観察し、研磨面は液相補給性に影響を与える化合物を観察した。

3. 実験結果

3. 1 Fe添加によるHTSと力学特性への影響

図1にI-beam試験で取得したFe量とHTSの関係を示す。Fe量の増加によりHTSが上昇した。図2にI-beam試験で取得したFe量と割れ発生温度の関係を示す。Fe量の増加が割れ発生温度を上昇させることが確認された。

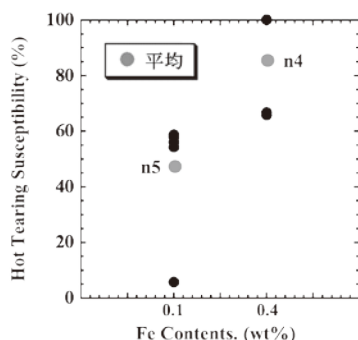


図1 Fe量とHTSの関係

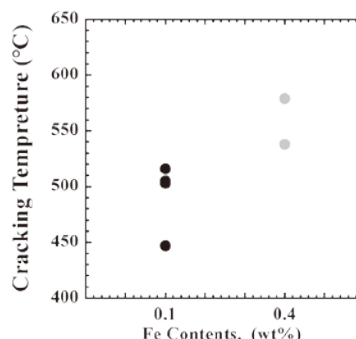


図2 Fe量と割れ発生温度の関係

3. 2 Fe添加による金属間化合物への影響

図3, 図4にI-beam試験の研磨面の腐食組織画像と破面のSEM画像とを示す。図3はFe量が0.1 wt%の試験片について、図4はFe量が0.4 wt%の試験片についての観察結果である。研磨面は破面から10 mm離れた位置で観察を行った。研磨面ではFe量の増加で化合物相の増加が確認された一方で、破面においてはFe量の増加で化合物の増加は見られなかった。

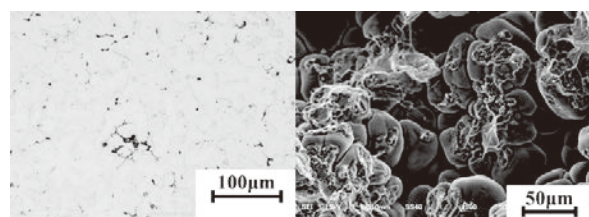


図3 研磨面と破面の画像 (0.1Fe)

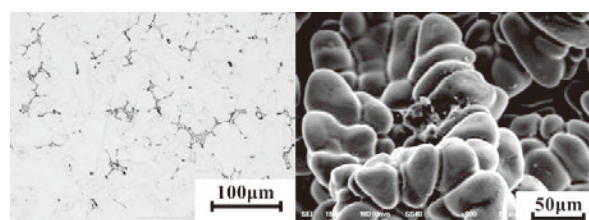


図4 研磨面と破面の画像 (0.4Fe)

4. 結 言

Al-Mg系合金において、Fe量の増加によりHTSが上昇することが示された。Fe量を増加させると高い温度、即ち液相率の高い状態で割れが発生している。また、Fe量が0.4 wt%の場合は0.1 wt%の場合と比べて破面での析出量が少ない。一方で破面から離れた箇所では析出量が多く、偏析している。以上から、Feを増量することにより液相補給が阻害されることでHTSが増加する一因となりうることが示された。

1. 緒 言

TiCヘテロ凝固核は、 α 相へ相変態する前のTi-6Al-4Vの凝固時の初晶である旧 β 粒を微細化させる¹⁾。旧 β 粒の核生成サイトとして機能するTiC数を評価するため、るつば壁面の凹凸や浮力対流等の核生成要因を排除できる国際宇宙ステーションの静電浮遊炉 (ISS-ELF) で溶融凝固実験を行った²⁾。宇宙実験試料の数は限られているため、試料全体の旧 β 粒数を推定するための非破壊検量法として、高輝度放射光施設 SPring-8 を用いたX線回折 (XRD) を実施した。本研究の目的は、ISS-ELF 試料のXRD像による旧 β 粒数推定法を確立することである。

2. 方 法

TiCを5 mass%添加したTi-6Al-4VをISS-ELFにて溶融凝固させた。この実験は、試料中に溶け残ったTiCが旧 β 粒の微細化に寄与する加熱条件³⁾で行った。XRDはSPring-8のBL20XUにて。X線波長 3.28×10^{-14} m, 試料-検出器間距離51 mmで実施した。XRD像は、測定中の試料の回転角度 ω が 0.5° 変化するごとに1枚取得し、 360° 回転で計720枚得た。各XRD像は 2048×2048 pixels (px) で構成された。回転対称性を考慮し、以降の解析には、 0° から 185.5° までの360枚の画像のみを使用した。各画像について、各ピクセル座標で輝度 I を記録した。実験系由来の定常信号とみなしたバックグラウンドフィルタとして、360枚を対象に、各ピクセル座標における輝度の中央値 I_0 を取得した。バックグラウンド信号に対して有意な信号を検出するため、対数差分 $\log(I/I_0)$ を計算した。この $\log(I/I_0)$ の値を回折結果としてプロットした。六方最密充填 (HCP) 構造をもつ α 粒は、13種類の結晶面の回折スポットが検出されうる。一方、体心立方格子 (BCC) 構造をもつ旧 β 粒は、4種類の結晶面の回折スポットが検出されうる。Bragg則を用いて各結晶面に対応する回折角 2θ を計算し、対応する半径をもつ回折リングを描画した。

3. 結 果

溶融凝固実験により直径2.2 mmの試料が得られた。測定されたXRD像と像を構成する回折スポットの解析結果を図1に示す。図1(a)において、 α 相の $\{10\bar{1}0\}$ 面に対応するリングは、リング全体の平均輝度が最も高かった。また、そのリング上に存在するスポットが、近傍の α 相の $\{0002\}$ 面、 $\{10\bar{1}0\}$ 面および β 相の $\{110\}$ 面と重ならなかった。

4. 考 察

ω の定義より、連続するフレーム番号を持つXRD像内のスポットは、結晶内で互いに近い空間座標を持つ。さらに、

XRD像上におけるスポットの方位角は、結晶面の試料座標系に対する方向に依存する。したがって、XRD像内で連結している α 粒の回折スポットは、相変態前に同一の旧 β 粒に属していたと考えられる。そこで、連続するフレームでスポット領域が重なる回折スポットを、旧 β 粒を表す単一のスポットとして定義した。この条件を満たすスポットの最大面積を単位 px^2 の代表値とした。この値は、検出器のピクセルサイズ 0.019 mm を用いて、単位 mm^2 の粒の最大投影面積 $A_{\max}$ に換算できる。この値が 0.012 mm^2 より小さい孤立スポットはデータ欠損とし、1ピクセル膨張収縮処理によって除去した。ノイズ処理後の回折スポットの $A_{\max}$ のヒストグラムを図1(b)に示す。図1(b)において、回折スポットが連結していた $A_{\max} \geq 0.0151 \text{ mm}^2$ のグループを旧 β 粒とみなした。この範囲における平均面積は $9.5 \times 10^{-2} \text{ mm}^2$ と算出された。この値を球相当体積 $1.5 \times 10^{-2} \text{ mm}^3$ に換算し、試料体積 6.0 mm^3 をこの体積で除算することで、微細化試料中の粒子数を 4.0×10^2 個と推定した。この結果は、同試料に対してポロノイ分割 (VT) 法を用いて得られた粒子数推定結果²⁾と一致した。

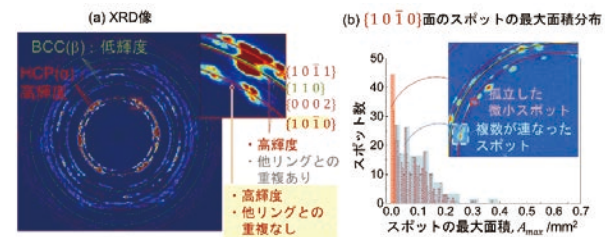


図1. バックグラウンド処理後の旧 β 粒微細化条件試料の回折像。(a) α 相は赤色、 β 相は緑色のリング。(b) $[10\bar{1}0]$ 面の回折スポットの最大面積 $A_{\max}$ のヒストグラム。

5. 結 言

ISS-ELF 試料のXRD像による旧 β 粒数推定法の確立を目的として、SPring-8のBL20XUにてXRDを行った。得られた回折像に対し、連続する α 粒の回折スポットは相変態前に同一の旧 β 粒に属していたという仮定から、複数の連なったスポットが出現した閾値 $A_{\max} \geq 0.0151 \text{ mm}^2$ を適用して旧 β 粒数を 4.0×10^2 個と推定した。この推定値が先行研究の推定値の範囲に収まったことから、本手法が非破壊粒数検量法として有効であることを示した。

参考文献

- 1) Y. Watanabe *et al.*, Metall. Mater. Trans. A, **51** (2019) 1345.
- 2) K. Kadoi *et al.*, Proceedings of the 75th International Astronautical Congress, Milan, Italy (2024), IAC-24-A2.6.7.
- 3) Y. Mabuchi *et al.*, Int. J. Microgravity Sci. Appl., **41** (2024) 410201.

本研究では、GDC材を用いた曲げ試験を行い、曲げ特性からPDC機械特性を予測することを最終的な目標とする。曲げ試験による強度評価として、曲げ0.1%耐力と引張0.2%耐力との比較を行った。また、曲げ試験で得られる曲げ角度は、引張試験より簡易的かつ欠陥等の影響を受けにくい事が特徴としてある。さらに、ワイブル分布解析を行い、欠陥の影響を受けたと考えられるデータを除去することで、よりバラツキの少ない特性値を用いて評価を行う。

図1に示すFCD400材金型を用いて、平板形状の鋳物を取得した。金型温度は $120 \pm 10^\circ\text{C}$ 、注湯時間は約170mlの溶湯量に対して0.3~0.5sとした。離型剤塗布は、BNスプレーを用いて金型が白色になるまで塗布を行った。

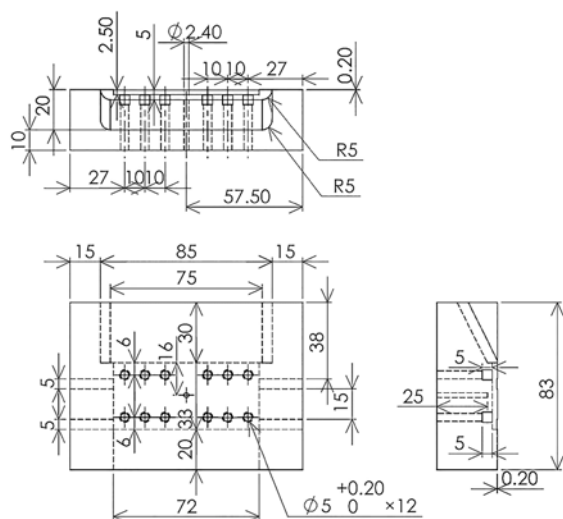


图1 重力铸造用金型

三点曲げ試験を行い、曲げ耐力及び曲げ角度を算出した。曲げ耐力は、曲げ応力-歪線図から引張耐力を予測するにあたり、引張0.2%耐力に概ね近い値を定義して関係式を作成した。曲げ角度は、VDA（ドイツ自動車工学会）規格のストロークとの関係式¹⁾を用いて、荷重-ストローク線図より算出した。最大荷重時のストロークを鋳物の損傷開始点として、曲げ角度による延性評価の基準とした。

曲げ耐力として、弾性限界付近の0.1%耐力を選定した。図2に、GDC材曲げ0.1%耐力とPDC材引張0.2%耐力の関係を示す。PDC材は、ゲート側の肉厚2mm試験片を採取した。曲げ耐力よりPDC引張耐力を予測するにあたり、 $y=0.92x$ の関係にあった。今後、他組成での評価を加えて、さらなる検証を行う。

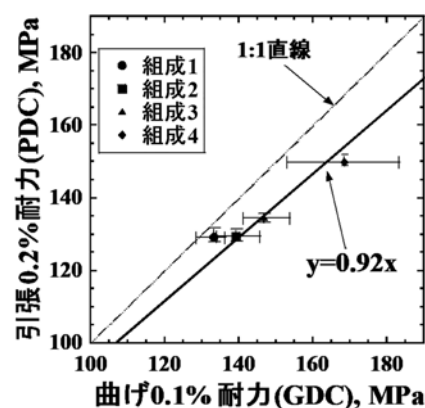


図2 曲げ0.1%耐力 vs 引張0.2%耐力

ワイブル分布解析で、尺度母数（代表値）、形状母数 m （バラつき）により評価が可能である。図3に、曲げ角度の解析結果を示す。線形に分布した値は材料固有の特性を表している。一方、群Xのように近似直線から逸脱した値は、何らかの製造欠陥の発生が考えられるため、これらを除いたデータを用いて、平均値または尺度母数による評価を行うことを提案する。

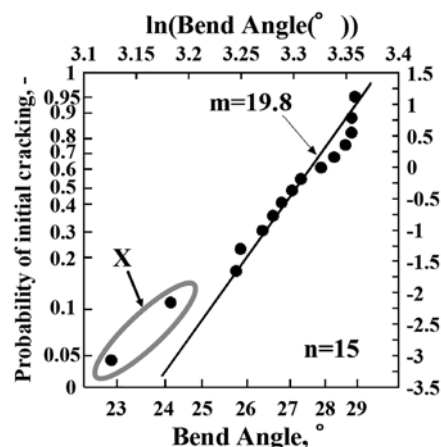


図3 曲げ角度のワイブル分布解析

参考文献

- 1) K. Cheong et al.: J. Phys.: Conf. Ser., 896 (2017) 012075.

材研研究奨励生 鯉川智生

Er添加酸化物のアップコンバージョン発光波長分布

1. 緒 言

低エネルギー光を高エネルギー光に変換するアップコンバージョン (UC) 蛍光体は、様々な応用が期待されており、その中でも、太陽電池とハイブリッド化することで、今まで発電に寄与できていなかった近赤外光を可視光に変換し、太陽電池の高効率化を目指すことができる利点があるため、長寿命高輝度UC蛍光体の開発が重要視されている[1]。しかし、現存のUC蛍光体は、近赤外光レーザーを用いたものに限定されており、また発光メカニズムが十分に解明されていないことから高効率化に向けて解明することが重要である。

本年度の研究において、長寿命高輝度UC蛍光体として知られる酸化物に発光中心となるErを添加した系について検討し、高輝度化および発光メカニズム解明に取り組んでいる。その成果を国内学会[2, 3]、および国際会議[4]、さらにUC蛍光体の高輝度化に向けた取り組みを国際論文[5]として発表した。ここでは、成果の一例としてEr添加 CaIn_2O_4 のUC発光特性分布の変化について示す[4]。

2. 実験方法

原料として CaCO_3 、 In_2O_3 、 Er_2O_3 粉末を用い、固相反応法で試料作製を行った。 CaCO_3 の脱水を行い、それぞれの原料粉末を Er_2O_3 の添加量を変化させて秤量後、混合粉碎しペレット状に成型し、大気中1300℃で6時間焼結を行った。合成した試料に対して、粉末X線回折 (XRD) 測定により結晶構造解析および相同定、紫外可視 (UV-vis) 拡散反射スペクトル測定から電子状態評価を行った。また、UC発光スペクトル測定は980 nm小型レーザーと小型分光器を用いて測定した。更に上記結果の評価のために、第一原理計算による検討も行い、Erを置換することによる単位胞体積変化や、対象系での固溶エネルギーを評価し欠陥形成機構について検討した。

3. 結果と考察

XRD測定結果からErの添加量が12 mol%までにおいては直方晶単相であることを確認したが、それ以上のEr添加量の試料では Er_2O_3 原料が析出することを確認した。XRDの測定結果から単位胞体積を算出し、単位胞体積の変化からErの固溶限を求めたところ、13.3 mol%となった。さらに第一原理計算によるEr添加による体積変化を上記の実験結果と比較した。計算によるEr添加した系については、イオン半径と電荷補償の観点から、(i) 3つの Ca^{2+} を2つの Er^{3+} 置換した系 ($3\text{Ca}^{2+} \rightarrow 2\text{Er}^{3+} + \text{V}_{\text{Ca}}$)、(ii) 1つの In^{3+} を1つの Er^{3+} で置換した系 ($\text{In}^{3+} \rightarrow \text{Er}^{3+}$)、(iii) 3つの Ca^{2+} と1つの In^{3+} を3つの Er^{3+} で置換した系 ($3\text{Ca}^{2+} + \text{In}^{3+} \rightarrow 3\text{Er}^{3+} + \text{V}_{\text{Ca}}$) の3つである。これらの結果と実験値の比較より、(ii) の系

が最もXRDで算出した実験値と単位胞体積変化に近いことが確認できた。さらに第一原理計算から固溶エネルギーの検討も行い、その結果においても(ii)の系が最も固溶エネルギーが低いことが確認でき、 Er^{3+} の固溶位置を確定することができた。

次に、UCスペクトル測定結果よりErの添加量が5 mol%のとき500-600 nm付近のUC発光強度が最大、また15 mol%のとき600-700 nm付近のUC発光強度が最大であり、Erの添加量が変わることによってUC発光波長分布が変化していることを確認した。

電子状態評価のためにUV-Vis測定を行い、その結果から緑色と赤色発光に大きく寄与されると推定できる $^4\text{H}_{11/2}$ 、 $^4\text{S}_{3/2}$ と $^4\text{F}_{9/2}$ 準位の吸収率がEr添加によって変化していることが確認できた。Er添加量が5 mol%の場合、 $^4\text{F}_{9/2}$ 準位の吸収率が小さいため、 $^4\text{H}_{11/2}$ 、 $^4\text{S}_{3/2}$ からの遷移が他の遷移より起こりやすいことが示唆される。一方でErを15 mol%添加することで $^4\text{F}_{9/2}$ 準位の吸収率が大きくなるため、他の遷移より当該遷移の方が起こりやすくなると示唆され、赤色に強く発光する要因であると考えられる。

4. 結 言

固相反応法より作製したEr添加 CaIn_2O_4 において、 Er^{3+} は In^{3+} サイトに置換され、Erの添加量が13.3 mol%まで固溶することをXRDおよび第一原理計算の結果から確認することができた。さらにErの添加量が5 mol%の場合、緑色に強くUC発光するが、15 mol%の場合は赤色に強くUC発光されErの添加量によってUC発光の波長分布が変化することが確認できた。これは置換されるErの添加量によって、緑色や赤色の発光に大きく関わりのある $^4\text{H}_{11/2}$ 、 $^4\text{S}_{3/2}$ と $^4\text{F}_{9/2}$ 準位の遷移確率の変化に起因することがUV-Visスペクトルの測定結果から示唆された。

5. 参考文献

- [1] A. Ishii et al., *Adv. Optical Mater.* 2025, e01682.
- [2] 鯉川智生他, 日本セラミックス協会 第38回秋季シンポジウム, 2025/09/17-19, 群馬.
- [3] 鯉川智生他, 日本セラミックス協会 2026年年会, 2026/03/04-06, 神奈川.
- [4] T. Koikawa et al., 8th ICAE 2025, November 25-28, 2025, Jeju, Korea.
- [5] T. Koikawa and T. Yamamoto, *Opt. Mater.*, 163 (2025) 116959.

6. 謝 辞

本研究は、早稲田大学材料技術研究所とタルトゥ大学との共同研究として行われたものである。

Electrophoretic Co-Deposition of Inhibitor-Loaded Mg-Al Layered Double Hydroxide Coatings for Enhanced Corrosion Resistance of Al alloy

Research Background and Purpose

Aluminum (Al) alloys, particularly AA6061, are widely used as lightweight structural materials in automotive and construction applications. However, when used in contact with dissimilar materials such as steel or carbon-fiber-reinforced plastics, Al alloys are susceptible to galvanic corrosion. In addition, intermetallic precipitates (IMPs) distributed within the alloy matrix act as local cathodic or anodic sites, promoting micro-galvanic corrosion and localized attack.

In our previous work, we demonstrated that the coating of layered double hydroxide (LDH) intercalated NO_3^- ions (LDHNO_3), which possess anion-exchange property, enabling them to store corrosion inhibitor anions, preferentially formed on IMPs by electrodeposition enhanced the corrosion resistance of AA6061 via suppression of cathodic reactions on IMPs; however, their protective ability decreased when exposure for long-term corrosion. The purpose of this research was to further improve corrosion resistance of LDHNO_3 coatings by incorporating corrosion inhibitor (MoO_4^{2-}) into LDH through electrophoretic co-deposition (EP co-deposition).

Research Methods

LDH particles loaded with MoO_4^{2-} inhibitors (LDHMoO_4) were synthesized and subsequently suspended in the solution containing $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2$ and $\text{Al}(\text{NO}_3)_3$. The EP co-deposition was carried out at room temperature under controlled constant-voltage for 120 s.

Corrosion resistance was evaluated by electrochemical measurements in a NaCl solution and wet-dry cyclic corrosion tests under atmospheric environments containing Cl^- ions.

Results and Discussion

The surface morphological and cross-sectional observations using FIB-SEM revealed that the composite coating of LDHNO_3 islands embedded with LDHMoO_4 particles preferentially formed on IMPs. Raman spectra confirmed that the co-deposition of LDHNO_3 islands and LDHMoO_4 particles successfully fabricated via the EP co-deposition.

In the electrochemical test, LDHNO_3 islands, which act as physical barriers, effectively suppressed cathodic reactions at IMPs sites. The wet-dry corrosion test demonstrated that the composite LDH coating containing LDHMoO_4 particles exhibited significantly reduced corrosion pits compared with LDH coatings without corrosion inhibitors. Raman spectra indicated that MoO_4^{2-} inhibitors were released via anion exchange during exposure, contributing to active corrosion inhibition.

Research Outcomes and Significance

This research established an effective and rapid method to fabricate the composite coating of LDHNO_3 islands and inhibitor-loaded LDH particles. The proposed composite coating provides both physical barrier protection and corrosion inhibition, promoting a promising approach for an anticorrosion coating for Al alloys.

The achievements of this research were presented at an international conference, EUROCORR 2025, in Norway. In addition, it also was published at 腐食防食学会 第72回材料と環境討論会, where received 若手講演奨励, and 第12回 ZAIKEN Festa, where received 奨励賞, demonstrating its scientific significance and high level of recognition.

1) S. Hiromoto, K. Fukuzawa, *J. Electrochem. Soc.*, **17** (2023).

2) S. Trakuldit, S. Hiromoto, *Surf. Coat. Technol.*, **511** (2025).

ビルディングブロック法を用いた合金組成の制御可能な新規多孔質担体の合成

1. 研究背景

担持金属触媒は、担体上に活性金属を固定化した不均一系触媒であり、耐熱性や生成物分離の容易さから工業的に広く利用されている。しかし、不均一な表面環境に起因して反応点の性質が多様化するため、高い選択性を要するファインケミカル合成への適用は限定的である。この課題に対し、担持金属の形状や分散性を精密に制御する研究が進められており、とくに単原子触媒 (SAC) は金属利用効率と特異的活性の観点から注目されている。一方で、SAC は熱力学的に不安定であり、凝集による劣化が大きな問題となる[1]。単原子合金触媒 (SAAC) は、金属担体との合金化によりリガンド効果やアンサンプル効果を活用できる有望な系であるが、金属結合に依存するため凝集抑制が困難であり、実用化に制約がある[2]。そこで本研究では、多孔体内部に金属種を物理的に閉じ込めることで凝集を抑制する手法に着目した[3]。多孔体の空間制約は金属の拡散や結晶成長を抑制し、高い安定性を付与できると期待される。しかし、従来法では金属の位置やサイズ制御が困難であった。そこで、ビルディングブロック法により官能基を規則的に導入した多孔体を設計し、還元能を有するヒドロシシル基を利用した位置選択的金属担持を試みた。本研究ではまずAuの均一担持に成功しており[4]、本報告ではその担体への合金担持および材料改良について述べる。

2. 結果および考察

既報文献[5]に基づいて、H終端のかご型シロキサンであるQ8H8の分散液を調製した。溶液中のSi濃度を ^{29}Si NMRで定量し、脱エタノール反応が量論で進行するように架橋剤を加えた。混合物を80℃で還流すると、白色固体が析出した。(ここではTESQ8H8と呼称する) この固体をエタノールで洗浄した後、塩化金酸・硝酸パラジウムおよびそれらの混合溶液に含浸させた。その際、金属塩の混合比に応じて、 $\text{Au}_{100-x}\text{Pd}_x/\text{TESQ8H8}$ と表記する。この材料がヒドロシシル基の酸化に伴い金属種を還元することは過去に示されている。 $\text{Au}_0\text{Pd}_{100}/\text{TESQ8H8}$ のTEM像ではPd粒子が相互作用の比較的少ないシリカの中では非常に高い分散性で担持されていることが確認された。また、その分散性は $\text{Au}_{100}\text{Pd}_0/\text{TESQ8H8}$ よりも大きい。この

現象は他文献でも報告されている傾向である[6]。続いて $\text{Au}_{50}\text{Pd}_{50}/\text{TESQ8H8}$ では、Pd-Au合金ナノ粒子の存在が高い分散性で配置されていることがEDSマッピングから確認された。一方で、Auのみ、Pdのみの粒子の存在も確認された。他方でArスパッタリングを伴うXPS測定を行った結果は $\text{Au}_0\text{Pd}_{100}/\text{TESQ8H8}$ および $\text{Au}_{50}\text{Pd}_{50}/\text{TESQ8H8}$ の存在割合は、バルク内部でほとんど一定であることが分かった。これらの結果は、この材料は深さ方向に関する金属導入の均質性の高さや組成制御を達成している一方で、粒子レベルでの配置選択性が十分高くないことを示している。そこで、貴金属との相互作用の強いメルカプト基を有するMPTESを架橋剤として使用した材料の改良を行った。MPTESのみを架橋する場合や、長時間MPTESを還流する場合には、マイクロ孔が閉塞する結果が得られた。そこで、TESを先に加え還流し、核発生が起きるタイミングでMPTESを加えると、マイクロ孔を維持した材料が合成された。AuやPdを担持させた場合には、金属クラスターの存在が示唆され、MPTES導入前と比較して分散性の向上が確認された。(図1) 今後は合金を導入し、粒子レベルでの選択性向上を試みる。

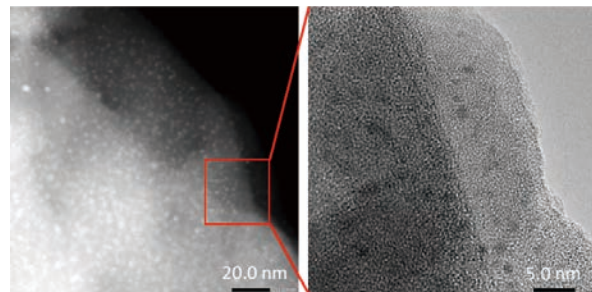


図1 MPTES導入TESQ8H8における担持Au粒子のSTEM像およびTEM像

3. 参考文献

- [1] X. H. Jiang *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **59** (2020), 23112.
- [2] Z. Xu *et al.*, *J. Hazard. Mater.*, **424** (2022), 127427.
- [3] M. Mliner *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **138** (2016), 15743.
- [4] T. Masuda *et al.*, *Dalton Trans.*, **54** (2025), 15991.
- [5] M. Igarashi *et al.*, *Nat. Commun.*, **12** (2021), 7025.
- [6] E. Eom *et al.*, *JACS Au*, **2** (2022), 2327.

2025年度業績リスト

1. 受賞	54
2. 著書・論文	55

荒尾与史彦 研究員	55
岩瀬 英治 研究員	55
大久保將史 研究員	55
勝藤 拓郎 研究員	55
川田 宏之 研究員	56
下嶋 敦 研究員	56
菅原 義之 研究員	57
鈴木 進補 研究員	57
関根 泰 研究員	58
平田 秋彦 研究員	60
細井 厚志 研究員	60
柳谷 隆彦 研究員	61
山口 勉功 研究員	61
山本 知之 研究員	62
吉田 誠 研究員	63

(以上50音順)

1. 受 賞

研究員 平田 秋彦

賞 名	授賞機関及び受賞理由
大隈学術褒章（奨励賞）	早稲田大学 研究上顕著な業績をおさめたため。 2025年12月12日

2. 著書・論文

研究員 荒尾与史彦

K. Ogawa, K. Tanaka, T. Takase, R. Sano, A. Hosoi, S. Harashima, K. Nakamura, Y. Arai Self-assembling of few-layer graphene onto glass fibers and strength enhancement mechanism of graphene-enhanced glass fiber-reinforced plastics <i>Composites Part A</i> , Vol. 206 (2026), 109814.
E. Orihara, R. Takei, K. Sugata, Y. Arai Exfoliation of graphite via three-roll milling and production of films with high electrical conductivity and electromagnetic interference shielding <i>Journal of Materials Science: Materials in Engineering</i> , Vol. 21 (2026).
B. Bie, Y. Ogura, H. Ono, Y. Arai High-modulus composite films fabricated via adsorption between delaminated cellulose nanofibers and graphene nanoplatelet <i>ACS Applied Materials & Interfaces</i> , Vol. 17 (2025), 46034-46045.

研究員 岩瀬 英治

S. Terashima, M. Ohnishi, J. Shiomi and E. Iwase Pop-up Kirigami Thermoelectric Generator with High Stretchability with Conformable Thermal interfaces <i>npj Flexible Electronics</i> , 9 (2025), 105 (11 pages).
R. Nagahiro, B. Xu, S. Terashima, Y. Li, Y. Li, Y. Liao, Z. Fang, C. Shao, M. Ohnishi, S. Kato, E. Iwase and J. Shiomi Module-scale Silicon 3D Softened Nanoarchitectures for Eco-friendly Thermoelectric Energy Harvesting <i>Materials Today Physics</i> , 57 (2025), 101798 (11 pages).

研究員 大久保将史

H. Uematsu, N. Ishiguro, K. Kawai, Y. Sasaki, O. Sekizawa, M. Okubo, Y. Takahashi “Multidimensional Tracking and Clustering of Electrochemical Reactions in Positive Electrode of Lithium-ion Battery via Operando X-ray Nanoscale Chemical Imaging” <i>Chem. Biomed. Imaging</i> , 2026, 4, 44-53.
K. Kawai, S. Nishimura, M. Okubo, A. Yamada “Advanced Positive Electrode Materials for Lithium-Ion Batteries” <i>J. Ceram. Soc. Jpn.</i> , 2025, 133, 434-443.
X. M. Shi, K. Kawai, M. Okubo, A. Yamada “Sequential structural evolution triggered by O-O dimerization in oxygen-redox reactions” <i>Adv. Energy Mater.</i> , 2025, 2405714-1~9.
K. Kawai, S. H. Jang, Y. Igarashi, K. Yazawa, K. Gotoh, J. Kikkawa, A. Yamada, Y. Tateyama, M. Okubo “Proton Intercalation into an Open-Tunnel Bronze Phase with Near-Zero Volume Change” <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> , 2025, 64, e202410971-1~8.
K. Kawai, Y. Ando, M. Okubo “Machine learning-assisted survey on charge storage of MXenes in aqueous electrolytes” <i>Small Methods</i> , 2025, 9, 2400062-1~11.

研究員 勝藤 拓郎

T. Katsufuji, H. Takei and Y. Shiraishi Magnetic properties of the two-phase coexisting state caused by orbital ordering in $\text{BaV}_{10-x}\text{T}_x\text{O}_{15}$ ($x = 0.15$) <i>Phys. Rev. B</i> 113 (2026), L020410-1~5
D. Takegami, H. Takei, M. Yoshimura, T. Katsufuji, T. Mizokawa Yb 4 <i>f</i> -Ta 5 <i>d</i> Hybridization and Valence Evolution in Tetragonal Tungsten Bronze $\text{Ba}_{3-x}\text{Yb}_x\text{Ta}_5\text{O}_{15}$ <i>J. Phys. Soc. Jpn.</i> 95 (2026), 024708-1~6
S. Kusakabe, R. Mikawa, H. Takei, T. Katsufuji, Y. Kawasugi, and T. Suzuki Magnetotransport of the square-net topological semimetal with magnetization plateaus DyAgSb_2 <i>Phys. Rev. B</i> 112 (2025), 205119-1~8

M. Nakano, T. Kobayashi, and T. Katsufuji Coupling between Orbital and Spin Degrees of Freedom in Jahn-Teller Ions for $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x\text{V}_2\text{O}_4$ Phys. Rev. Lett. 135 (2025), 186701-1~7
D. Urushihara, A. Nakamura, K. Nakajima, K. Fukuda, S. Nakamura, T. Katsufuji and T. Asaka Octahedral Rotation Change in the Ruddlesden-Popper Compound $\text{Gd}_3\text{Ba}_2\text{Fe}_4\text{O}_{12.5}$ by Topotactically Introduced Oxide Ions Inorg. Chem. 64 (2025), 9835-9841

研究員 川田 宏之

S. Takashiro, Y. Sugeno, A. Hosoi, H. Kawada "Influence of electropulsing on fatigue crack growth retardation in hot-work die steel" Mechanical Engineering Journal, 2026, accepted.
T. Isogai, H. Saitoh, A. Hosoi, D. Tsunoda, H. Koshita, H. Kawada "Effects of material composition on fatigue properties of short aramid fiber reinforced plastics using hybrid non-destructive testing methods" Mechanical Engineering Journal, 2026, accepted.
M. Otsubo, R. Tajiri, A. Hosoi, T. Sakurai, T. Yamatogi, K. Kimoto, H. Kawada "Experimental evaluation of fatigue properties and failure mechanisms of thick carbon fiber-reinforced plastic laminates under three-point bending load" Advanced Composite Materials, 2026, accepted.
T. Matsuo, Y. Nishi, H. Saito, A. Hosoi, H. Kawada "Effects of self-heating on fatigue behavior of quasi-isotropic CFRP laminates under ultrasonic loading, Advanced Composite Materials" 2026, 1-18. (https://doi.org/10.1080/09243046.2026.2641271).
R. Sano, Y. Koga, I. Sumi, A. Hosoi, K. Kawahara, H. Matsutani, H. Kawada "Evaluation of fatigue fracture mechanism of carbon fiber-reinforced foams using nondestructive testing and fatigue life prediction using damage mechanics" Composites Science and Technology, 2025, 111502 (https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2025.111502).
K. Kometani, A. Hosoi, H. Kawada "Interfacial microstructure effects on the bonding strength and interlaminar fracture toughness of aluminum alloys thermally bonded to carbon fiber-reinforced polyetheretherketone" Surface Science and Technology, 2025, 3, 18 (https://doi.org/10.1007/s44251-025-00082-9).
細井厚志, 川田宏之 「炭素繊維強化プラスチック積層板の超高サイクル疲労 後編 擬似等方炭素繊維強化プラスチック積層板の超高サイクル疲労特性の評価」 機械の研究, 2025, 77, 12, 874-879.

研究員 下嶋 敦

T. Hikino, H. Mochizuki, T. Matsuno, K. Kuroda, A. Shimojima Tailoring nanoporous aluminosilicates with well-defined $\text{Al}(\text{OSi})_4$ sites using dimethylsilanol-modified cage siloxanes and ammonium cations <i>Chem. Commun.</i> , 61 , 7337-7340 (2025). https://doi.org/10.1039/D5CC00004A
D. Oka, K. Takaoka, A. Shimojima, T. Matsuno Quasi-Single-Crystalline Inverse Opal $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ Prepared via Diffusion and Oxidation of the FeCl_3 Precursor in Nanospaces <i>Chem. Mater.</i> , 37 , 5005-5014 (2025). https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.5c00155
T. Matsuno, G. Koinuma, H. Wada, A. Shimojima, and K. Kuroda Fabrication of three-dimensionally ordered mesoporous zirconia using nanoporous carbon as a scaffold <i>New J. Chem.</i> , 49 , 16617-16624 (2025). https://doi.org/10.1039/D5NJ01465D
S. Hasebe, M. Yatomi, N. Hori, T. Iwakami, T. Matsuno, A. Shimojima Hierarchically Porous Materials via Co-Assembly of Exfoliated Layered Silicate with Mesoporous Silica Nanoparticles <i>Langmuir</i> , 41 , 25954-25961 (2025). https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.langmuir.5c02517
T. Masuda, T. Hikino, R. Umeda, A. Shimojima, Y. Sekine Porous silica materials derived from cage-siloxane: structural confinement and stabilisation of dispersed Au (0) nanoparticles <i>Dalton Trans.</i> , 54 , 15991-15997 (2025). https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2025/dt/d5dt01824b

T. Okita, R. Uchida, A. Shimojima, and T. Matsuno Single-Crystalline Ordered Mesoporous Indium Tin Oxides with Controlled Sn/In Ratio via Vapor-Phase Oxidation of Metal Chlorides within Silica Colloidal Crystals <i>Dalton Trans.</i> , 55 , 6480-6486 (2026). https://pubs.rsc.org/en/Content/ArticleLanding/2026/DT/D5DT03043A
松野敬成, 下嶋 敦 動的機能を有するシロキサン系メソ構造体の設計 (特集 シロキサン結合を活用した元素ブロック材料の高機能化戦略) Design of siloxane-based mesostructures with dynamic functions セラミックス, 60 , 608-611 (2025).
下嶋 敦 かご型シロキサンのシリル化誘導体を用いたナノ多孔体合成の最近の展開 ケイ素化学協会誌, No. 42, 26-33 (2025).

研究員 菅原 義之

Lateral size modulated structural color of aqueous dispersions of titanate nanosheets <i>Chem. Commun.</i> , 62 , 3, (2026) 965-968
Preparation of nanosheet thin films by the mist deposition method and investigation of the formation mechanism of their structures <i>Mater. Today Commun.</i> , 50 , (2026) 114608
A universal approach for thin high-entropy oxides regulated by Ga ₂ O ₃ Layers for oxygen evolution reaction <i>Nat. Commun.</i> , 16 , 1, (2025) 6667
Dispersant-dependent exfoliation behavior of pristine HLaNb ₂ O ₇ ·xH ₂ O layered perovskite and its n-propoxy derivative in aspects of polarity and hydrolysis phenomena <i>Inorg. Chem.</i> , 64 , 43, (2025) 21398-21404
Hollow-structured high-entropy metal sulfide (Co, Ni, Cu, Zn, Mn) ₃ S ₄ as an efficient supercapacitor electrode <i>ACS Appl. Energy Mater.</i> , 8 , 19, (2025) 14118-12127
Well-dispersed CoFe-based nanoparticles embedded in N-doped mesoporous carbon spheres as an efficient electrocatalyst for oxygen reduction reaction <i>ACS Appl. Energy Mater.</i> , 8 , 19, (2025) 14228-14238
Concerted reactive adsorption and photocatalytic degradation of Bisphenol-S on molybdenum cluster-modified nanoceria <i>Inorg. Chem.</i> , 64 , 36, (2025) 18166-18174
One-step synthesis of Fe-doped SnO ₂ mesoporous thin films with enhanced electron transfer and magnetic properties <i>Ceram. Int.</i> , 51 , 22, (2025) 37753-37760
Machine-learning-guided multiscale design of nitrogen-doped carbon for enhanced supercapacitor performance <i>ACS Appl. Mater. Interfaces</i> , 17 , 36, (2025) 50967-50976
Enhancing unidirectional charge transfer between vacancy-mediated unilamellar LDH nanosheets and electric conductive counterparts toward overall water splitting <i>Chem. Eng. J.</i> , 516 , 163916 (2025)
Delamination of NiFe layered double hydroxides into perforated monolayers for efficient water splitting <i>J. Colloid Interface Sci.</i> , 692 , (2025) 137478
Hierarchical structure design of ZIF-derived CoNiFe LDH nanocages grown on Ag nanowires as high-performance cathode for Zn-air batteries <i>Small</i> , 21 , 23, (2025) 2502344

研究員 鈴木 進補

M. Shiinoki, E. Sondermann, A. Meyer, and S. Suzuki <i>Int. J. Heat and Mass Transfer</i> , 263 (2026) 128560
K. Kadoi, Y. Ueda, Y. Kushiya, H. Ueno, Y. Mabuchi, C. Hanada, H. Aoki, R. Saguchi, M. Yamada, H. Sato, Y. Watanabe, S. Nakano, and S. Suzuki <i>Int. J. Microgravity Sci. Appl.</i> , 42 (2025) 420203

Y. Wakai, N. Seto, N. Sato, D. Jodi, Y. Kushiya, and S. Suzuki <i>Progress in Additive Manufacturing</i> , 11 (2026) 257-271
Y. Kobayashi, K. Kawashima, M. Shiinoki, and S. Suzuki <i>Phys. Scr.</i> , 100 (2025) 105948
M. Maruyama, Y. Kushiya, N. Sato, N. Seto, and S. Suzuki <i>Int. J. Adv. Manuf. Technol.</i> , 141 (2025) 5407-5416
K. Kawashima, M. Shiinoki, Y. Kobayashi, and S. Suzuki <i>Defect Diffus. Forum</i> , 445 (2025) 39-51
T. Saito, H. Harada, M. Osawa, K. Kawagishi, and S. Suzuki <i>Mater. Sci. Eng. A</i> , 941 (2025) 148410
H. Tokunaga, Y. Wakai, N. Sato, N. Seto, S. Kajino, S. Suzuki, Y. Motoyama, and T. Okane <i>Int. J. Adv. Manuf. Technol.</i> , (Online First)
Y. Wakai, S. Yamamoto, H. Azuma, Y. Kushiya, S. Kajino, T. Okane, N. Sato, S. Nakano, T. Shimizu, and S. Suzuki <i>Int. J. Adv. Manuf. Technol.</i> (Online First)

研究員 関根 泰

R. Yamano, T. Higo and Y. Sekine* Low-temperature CO ₂ methanation over Ni catalysts supported on nanocrystalline CeO ₂ in an electric field RSC Advances, 16, 10538-10548, 2026. DOI: 10.1039/D5RA08683C
M. Hayashi, H. Orii, Y. Ofuchi, K. Mitarai, T. Higo, Y. Sekine* Effect of hetero-cation doping on Ru/CeO ₂ for ammonia decomposition at low temperature in an electric field Chemistry Letters, 55 (2), upag016, 2026. DOI: 10.1093/chemle/upag016
H. Tedzuka, S. Ogo, T. Higo, Y. Sekine* Low-temperature oxidative coupling of methane in an electric field over alkaline-earth-doped LaAlO ₃ perovskite catalysts Chemistry Letters, 55 (2), upag005, 2026. DOI: 10.1093/chemle/upag005
K. Nomoto, H. Akiyama, Y. Sekine, H. Miura, T. Shishido High-Durability Metal-Doped Cu/ZnO/Al ₂ O ₃ Catalysts for Reforming of Model Biomethanol Chemistry Open, 2026. DOI: 10.1002/open.202600010
M. Inagaki, M. Lee, T. G. Kim, E. Kazuma, J. Jung, M. Trenary, Y. Sekine and Y. Kim Multimode vibrational activation and energy transfer in single-molecule CO hopping on Pd (111) Journal of Chemistry Physics, 163, 224707, 2025. DOI: 10.1063/5.0304429
H. Tedzuka, H. Saito, N. Matsumoto, M. Nagasaka, H. Sato, Y. Sekine, T. Sugimoto Non-Thermal Catalytic Origin in DC-Enhanced Dry Reforming of Methane Unveiled by Multimodal Operando Analyses Journal of Physical Chemistry Letters, 16, 12973-12981, 2025. DOI: 10.1021/acs.jpclett.5c03159
T. Higo, K. Saegusa, S. Ishizaki, S. Kakiyara, Y. Yayama, Y. Hirano and Y. Sekine* Understanding the role of Pr doping in redox enhancement of CeO ₂ for reverse water-gas shift via chemical looping Journal of Physical Chemistry C, 129 (44), 19786-19793, 2025. DOI: 10.1021/acs.jpcc.5c04849
T. Masuda, T. Hikino, R. Umeda, A. Shimojima, Y. Sekine* Porous Silica Materials Derived from Cage-Siloxane: Structural Confinement and Stabilisation of Dispersed Au(0) Nanoparticles Dalton Transactions, 54, 15991-15997, 2025. DOI: 10.1039/D5DT01824B
H. Akiyama, K. Saegusa, H. Sampei, T. Higo, K. Maeda, T. Watanabe, S. Kado, H. Nakai, Y. Sekine* Enhancing chemoselectivity via strong metal-support interaction: selective hydrogenation of 4-chloronitrobenzene over Pd/TiO ₂ catalysts Applied Catalysis A: General, 708, 120540, 2025. DOI: 10.1016/j.apcata.2025.120540

C. Sampson, T. Masuda, T. Horiguchi, S. Ichiguchi, H. Sampei, H. Matsubara, S. Itagaki, G. Inoue, and Y. Sekine* Electrically assisted low-temperature dry reforming of methane suppressing carbon deposition under high-pressure conditions ACS Catalysis, 15, 12885-12896, 2025. doi: 10.1021/acscatal.5c03126
Y. Ofuchi, M. Hosokawa, N. Horie, S. Doi, S. Ogo, A. Onda, T. Hamaguchi, T. Saiki, and Y. Sekine* Efficient formation of C3 and C4 hydrocarbon from cellulose over Pt/Mg-doped ZrO₂ catalysts without hydrogen addition RSC Advances, 15, 16869-16878, 2025. doi: 10.1039/D5RA01826A
H. Sampei, T. Mizuguchi, K. Saegusa, M. Nakamura, K. Kimura, and Y. Sekine* Multidimensional Quantum Fourier Transform for Nanosheet Material Evaluation by Electron Microscopy: A Case of 2D Pattern Processing Phys. Chem. Chem. Phys., 27, 8656-8660, 2025. doi: 10.1039/D4CP04399E
K. Watanabe, T. Higo, K. Saegusa, S. Matsumoto, H. Sampei, Y. Isono, A. Shimojuku, H. Furusawa, and Y. Sekine* Oxidative Dehydrogenation of Ethane Combined with CO₂ Splitting via Chemical Looping on In₂O₃ Modified with Ni-Cu Alloy ACS Catalysis, 15, 7, 5876-5885, 2025. doi: 10.1021/acscatal.4c07737
K. Kang, H. Sampei, Y. Sekine* CO₂ conversion to CO by reverse water gas shift and dry reforming using chemical looping RSC Sustainability, 3, 1598-1628, 2025. doi: 10.1039/D4SU00395K
A. Shigemoto*, Y. Sekine* Recent Advances in Low-Temperature Nitrogen Oxide Reduction: Effects of Electric Field Application Chemical Communications, 61, 1559-1573, 2025. doi: 10.1039/D4CC05135A
林 美桜, 関根 泰 電場印加触媒プロセスによる低温でのアンモニア分解 セラミックス, in press.
林 美桜, 関根 泰 2-4-5 アンモニア合成反応 Ru/CeO₂ 触媒ハンドブック, in press.
島 謙斗, 関根 泰 3-1-3 逆水性ガスシフト反応/高分散 Ru 触媒 触媒ハンドブック, in press.
伊野田優来, 関根 泰 4-1-7 電場印加触媒プロセスを用いた三元触媒反応 Pd/Ce_{0.7}Zr_{0.3}O₂ 触媒ハンドブック, in press.
黒木啓介, 関根 泰 4-4-5 電場印加メタン燃焼 Pd/Ce_{0.25}Zr_{0.75}O₂ (CZO) 触媒ハンドブック, in press.
関根 泰 2-1-3 メタン電場改質用 Ni-YSZ 触媒 触媒ハンドブック, in press.
関根 泰 5-2-8 ケミカルルーピング型エタン脱水素 Ni-Cu-In₂O₃ 触媒ハンドブック, in press.
関根 泰 先端分野の動向 触媒年鑑2026, in press.
関根 泰, 室井高城 2025年度の海外の触媒技術動向 触媒年鑑2026, in press.
関根 泰 エネルギーの将来を見据えた燃料のあり方 ペトロテック, 48, 5, 2025.

関根 泰
二酸化炭素を高効率に転換するための触媒と材料の開拓
セラミックス, 60, 4, 2025.

研究員 平田 秋彦

A. Hirata, K. Nishio, M. Okugawa and R. Nakamura
Evidence of underlying structural similarities of amorphous materials
Commun. Mater., 6 (2025) 167.

S. Nakamura, Y. Usui, K. Nakayama, A. Hirata, and Y. Koyama
Understanding of the crystallographic features of icosahedral quasicrystals based on the atomic density wave model
Phil. Mag., 106 (6) (2025) 552-570.

Y. Satomi and A. Hirata
Cluster homology analysis of topological short-range order in Cu-Zr metallic glasses
Next Res., 2 (2025) 100713.

S. Zha and A. Hirata
Dynamic behavior of atomic clusters during structural relaxation in metallic glasses
J. Non-cryst. Solids, 657 (2025) 123509.

A. Hirata and Y. Satomi
Intermediate-range order in silica glass examined by experimental and virtual angstrom-beam electron diffraction
J. Ceram. Soc. Japan (in press).

S. Kohara, K. Kimura, M. Shiga, Y. Onodera, A. Hirata and K. Hayashi
Quantum beam diffraction measurement and topological analysis of tetrahedrally coordinated non-crystalline materials
J. Ceram. Soc. Japan (in press).

F. Munakata, T. Nakagawa, T. Ogiya, M. Takahashi, R. Miyata, R. Kobayashi and A. Hirata
Synthesis of phosphor single crystals SiAlON: Eu²⁺ grown from a Si melt in N₂
Mater. Lett., 397 (2025) 138838.

研究員 細井 厚志

S. Takashiro, Y. Sugeno, A. Hosoi, H. Kawada
Influence of electropulsing on fatigue crack growth retardation in hot-work die steel
Mechanical Engineering Journal, 2026, accepted.

T. Isogai, H. Saitoh, A. Hosoi, D. Tsunoda, H. Koshita, H. Kawada
Effects of material composition on fatigue properties of short aramid fiber reinforced plastics using hybrid non-destructive testing methods
Mechanical Engineering Journal, 2026, accepted.

K. Ogawa, K. Tanaka, T. Takase, R. Sano, A. Hosoi, S. Harashima, K. Nakamura, Y. Arao
Self-assembling of few-layer graphene onto glass fibers and strength enhancement mechanism of graphene-enhanced glass fiber-reinforced plastics
Composites Part A: Applied Science and Manufacturing, 2026, accepted.

M. Otsubo, R. Tajiri, A. Hosoi, T. Sakurai, T. Yamatogi, K. Kimoto, H. Kawada
Experimental evaluation of fatigue properties and failure mechanisms of thick carbon fiber-reinforced plastic laminates under three-point bending load
Advanced Composite Materials, 2026, accepted.

T. Matsuo, Y. Nishi, H. Saito, A. Hosoi, H. Kawada
Effects of self-heating on fatigue behavior of quasi-isotropic CFRP laminates under ultrasonic loading
Advanced Composite Materials, 2026, 1-18. (<https://doi.org/10.1080/09243046.2026.2641271>).

R. Sano, Y. Koga, I. Sumi, A. Hosoi, K. Kawahara, H. Matsutani, H. Kawada
Evaluation of fatigue fracture mechanism of carbon fiber-reinforced foams using nondestructive testing and fatigue life prediction using damage mechanics
Composites Science and Technology, 2025, 111502 (<https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2025.111502>).

K. Kometani, A. Hosoi, H. Kawada
Interfacial microstructure effects on the bonding strength and interlaminar fracture toughness of aluminum alloys thermally bonded to carbon fiber-reinforced polyetheretherketone
Surface Science and Technology, 2025, 3, 18 (<https://doi.org/10.1007/s44251-025-00082-9>).

細井厚志, 川田宏之 炭素繊維強化プラスチック積層板の超高サイクル疲労 後編 擬似等方炭素繊維強化プラスチック積層板の超高サイクル疲労特性の評価 機械の研究, 2025, 77, 12, 874-879.
細井厚志他 「シランカップリング処理によるアルミニウム合金とCFRTPの接合強度向」 シランカップリング剤の基礎と応用, シーエムシー出版, 第3章, 第3節, pp.158-168, 2026年3月.

研究員 柳谷 隆彦

Z. Qian, G. Zhang, Z. Lai, A. Hanai, Y. Xu, G. Wang, Y. Lu, J. Gu, T. Yanagitani, J. Jia, Q. Zheng “Tailoring thermal transport in (Sc, Yb) AlN thin films to the glassy limit” Acta Mater. vol. 304, 121767 (2026).
T. Yanagitani “A perspective and review of polarization inverted multilayer BAW resonators based on ScAlN piezoelectric films” Appl. Phys. Lett. vol. 127, 230501 (2025). 【Editor’s Pick】【招待論文】
K-H. Sano, Y. Ono, K. Tsukiyama, S. Nagai, A. Saito, Y. Hayashi, and T. Yanagitani “Damage-free vertical microfabrication of α -Quartz via HF gas-phase catalyst etching” ACS Appl. Mater. Interfaces (2025).
M. Suzuki, J. Sekimoto, K. Fukunaga, S. Kakio, and T. Yanagitani “High overtone mode bulk acoustic wave resonators with polarization inverted ScAlN or SiAlN/AlN films for next-generation high frequency communication systems” Jpn. J. Appl. Phys., vol. 64, no. 4, 040803 (2025). 【解説記事】
M. Suzuki, Y. Shimano, and T. Yanagitani “Determination of longitudinal wave and shear wave acoustic reflectivity of Bragg reflector in the GHz range” J. Acoust. Soc. Am. vol. 158, pp. 985-995 (2025).
Y. Shimano, C. Mita, and T. Yanagitani “A method for evaluating intrinsic mechanical quality factor Q_m of thin solid films such as ScAlN, GaN, metal materials using GHz pulse-echo technique” J. Appl. Phys., vol. 137, 214103 (2025).
S. Kinoshita, R. Karasawa, and T. Yanagitani “High-overtone mode piezoelectric transformer based on c-axis zigzag ScAlN multilayer for wake-up receiver applications” AIP Adv., vol. 15, 045010 (2025).

研究員 山口 勉功

山口勉功, 小川和宏 溶融フラックス法を用いたEVモータからのレアアースの分離回収 分離技術, 55 (2025), 57-64
T. Murata, R. Otake, K. Yamaguchi Phase Equilibria of the $\text{SiO}_2\text{-CaO-Al}_2\text{O}_3\text{-TiO}_x$ System Coexisting with Solid Fe at 1623 K Metal. Mater. Trans. B, 56 (2025). 2691-2699
T. Murata, T. Oishi, K. Yamaguchi Extraction of Terbium from Terbium - Iron Alloys Using Molten Magnesium Mater. Trans. 66 (2025), 724-732
T. Murata, T. Oishi, K. Yamaguchi Phase Equilibrium of the Mg-Fe-Tb System at 973 and 1273 K and Vacuum Distillation of Mg from Tb-Mg J. Sustainable Metallurgy, 12 (2026), 1448-1461

Z. Umar, O. Khyzhun, A. S. Burkhonzoda, D. D. Nematov, M. G. Brik, T. Yamamoto, M. Piasecki Anion-anion exchange effect on crystal, electronic and mechanical properties of eco-friendly lead-free Cs_2SnX_6 and CsSnX_3 halides when forming $\text{Cs}_2\text{SnX}_{6-x}\text{Y}_x$ and $\text{CsSnX}_{3-x}\text{Y}_x$ (X, Y = I, Br, Cl) solid solutions J. Solid State Chem. 359 (2026) 125968. https://doi.org/10.1016/j.jssc.2026.125968
Z. Umar, O. Khyzhun, A. Platonenko, T. Yamamoto, M. G. Brik, M. Piasecki Different calculating schemes for evaluating the transition emission energies in a Cr^{3+}-activated KMgF_3 phosphor: ΔSCF-DFT approaches Computational Condensed Matter 47 (2026) e01274. https://doi.org/10.1016/j.cocom.2026.e01274
A. Burkhonzoda, D. Nematov, M. S. Kurboniyon, M. Kayumov, I. Raufov, M. Hojamberdiev, K. Kholmurodov, T. Yamamoto Pressure-induced bandgap engineering, optical and mechanical properties of chlorine-doped CsSnI_3: A first-principles roadmap for high-efficiency solar cells Computational Condensed Matter 46 (2026) e01253. https://doi.org/10.1016/j.cocom.2026.e01253
T. K. Ly, H. C. Nguyen, T. Yamamoto A Causal Inference Approach to Assess the Effects of Atomic Concentration Changes on the Hardness of High-Entropy Alloys International Conference on Computational Collective Intelligence (2026) 152-166. https://doi.org/10.1007/978-3-032-09318-9_11
M. S. Kurboniyon, A. M. Srivastava, W. W. Beers, W. E. Cohen, M. Bagheri, B. Lou, T. Yamamoto, M. G. Brik, C.-G. Ma First-principles study of thermal quenching mechanism of Mn^{4+}-doped fluoride phosphors: Electronic structure, optical properties and phosphor design principles Chem. Eng. J. 525 (2025) 170227. https://doi.org/10.1016/j.cej.2025.170227
A. Burkhonzoda, D. Nematov, M. Kurboniyon, F. Shokir, M. Hojamberdiev, M. G. Brik, K. Kholmurodov, T. Yamamoto High-pressure effects on the structural, mechanical, and optoelectronic properties of the lead-free $\beta\text{-CsSnX}_3$ (X = I, Br, Cl) perovskite: Insights from first principle analyses Computational Condensed Matter 45 (2025) e01130-e01130. https://doi.org/10.1016/j.cocom.2025.e01130
N. H. Chau and T. Yamamoto Effects of changing atomic concentration of a single element on the yield strength of high-entropy alloys: A causal inference study Journal of Electronic Materials 54 (2025) 3663-3674. https://doi.org/10.1007/s11664-025-11852-4
Z. Umar, O. Khyzhun, M. S. Kurboniyon, T. Yamamoto, M. G. Brik, A. I. Popov, M. Piasecki Electronic structure and energy transitions in oxides and fluorides doped by octahedrally surrounded Cr^{3+} ions Opt. Mater. 160 (2025) 116681. https://doi.org/10.1016/j.optmat.2025.116681
Z. Umar, O. Khyzhuna, D. D. Nematov, A. S. Burkhonzoda, M. G. Brik, T. Yamamoto, M. Piasecki The effect of divalent ions on chemical stability of eco-friendly α, γ and δ phases of CsSnI_3 Comp. Condens. Matter 44 (2025) e01062. https://doi.org/10.1016/j.cocom.2025.e01062
T. Koikawa, T. Yamamoto Enhancement of up-conversion luminescence intensity of Er-doped CaMoO_4 by K_2CO_3 addition Opt. Mater. 163 (2025) 116959. https://doi.org/10.1016/j.optmat.2025.116959
M. S. Kurboniyon, S. Nurulkhakov, B. Liu, K. Rahmonov, A. M. Srivastava, M. G. Brik, T. Yamamoto, C.-G. Ma Influence of the First Cation A of A_2SiF_6: Mn^{4+} (A = K, Rb, Cs) Phosphors on Their Geometric Structures and the Optical Transition Energies: First Principles Analysis J. Electron Mater. 54 (2025) 962-969. https://doi.org/10.1007/s11664-024-11617-5

M. Shan, K. F. Muhammad, M. R. Muhammad, Y. H. Wong, M. Yoshida
Advancements in copper and silver sintering as interconnect materials in electronics applications: review
Journal of Materials Science: Materials in Electronics. 36 (2025), 28, 1803.

Y. Nagata, Y. Okimura, R. Miyachi, N. Takatori, T. Okane, M. K. Faiz, M. Yoshida
Development of a Solid Cohesion-Based Analytical Model for Predicting Norton–Hoff Viscous Parameters in Semi-Solid Aluminum Alloys and Its Experimental Validation
Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science. 56 (2025), 12, 5391-5404, 14.

2025年度業績リスト

3. 講演・発表	66
4. 特許	88

荒尾与史彦 研究員	66
岩瀬 英治 研究員	66
大久保將史 研究員	66
勝藤 拓郎 研究員	68
川田 宏之 研究員	69
小林 正和 研究員	70
下嶋 敦 研究員	71
菅原 義之 研究員	72
鈴木 進補 研究員	73
関根 泰 研究員	76
多辺 由佳 研究員	80
平田 秋彦 研究員	80
細井 厚志 研究員	80
柳谷 隆彦 研究員	82
山口 勉功 研究員	85
山本 知之 研究員	86

(以上50音順)

3. 講演・発表

研究員 荒尾与史彦

Self-assembling of anionic graphene onto glass fiber and its multiscale graphene-enhanced fiber-reinforced polymer composites for structural application Carbon 2025. 7. 1.
Enhancement of mechanical properties of carbon fiber/polypropylene composites with very small amount of epoxy resin ICM&P 2025, 2025. 11. 3.
Structural dependence of electromagnetic absorption in graphene nanoplatelet-based film ICM&P 2025, 2025. 11. 3.
High-modulus composite films fabricated via adsorption between delaminated cellulose nanofibers and graphene nanoplatelets ICM&P 2025, 2025. 11. 3.
Effect of glass fiber surface modification by tannic acid and polyethyleneimine on mechanical properties of glass fiber/epoxy composites ICM&P 2025, 2025. 11. 3.
グラフェン導電化GFRPの電気抵抗変化による損傷・ひずみセンシング 第17回日本複合材料会議, 2026. 3. 4.
熱可塑性エポキシ樹脂を用いたナノコンポジットの物性の調査 第17回日本複合材料会議, 2026. 3. 4.
分層構造により片面導電と高強度を両立したセルロースナノファイバー/グラフェン複合ヤススフィルム 第17回日本複合材料会議, 2026. 3. 4.

研究員 岩瀬 英治

ポリイミド銅基板を用いたRES構造の垂直圧縮に対する回復性の評価 第42回「センサ・マイクロマシンと応用システム」シンポジウム, 2025. 11. 10-13, 2025. 一般
高変形能と高発電性能を兼ね備えた切り紙型熱発電デバイス 日本機械学会 第16回マイクロ・ナノ工学シンポジウム, 2025. 11. 10-13, 招待
自己修復型金属配線における気泡発生の抑制方法の検討および評価 日本機械学会 第16回マイクロ・ナノ工学シンポジウム, 2025. 11. 10-13, 一般
自己修復型金属配線における修復形態の分類に関する検討 日本機械学会 第16回マイクロ・ナノ工学シンポジウム, 2025. 11. 10-13, 一般
折り紙型/切り紙型熱発電デバイスにおける断面熱量変化のシミュレーション 日本機械学会 第16回マイクロ・ナノ工学シンポジウム, 2025. 11. 10-13, 一般
自己修復型金属配線における配線インピーダンスの計測 日本機械学会 第16回マイクロ・ナノ工学シンポジウム, 2025. 11. 10-13, 一般
折り紙・切り紙・折り紙構造を用いた伸縮電子デバイス 応用物理学会 第85回秋季学術講演会, 2025. 9. 7-10, 招待
折り紙型/切り紙型熱発電デバイスの伝熱シミュレーション 令和7年度 電気学会E部門 総合研究会, 2025. 5. 29-30, 一般

研究員 大久保将史

M. Okubo “Pseudocapacitive MXenes for All-Solid-State Electrochemical Storage Devices” 8th International Conference on Advanced Capacitors (ICAC) 2025, Taipei, 12/1, 2025 (Invited).
M. Okubo “Thermal Stability Index of Sodium Layered Oxide Cathodes” 10th International Conference on Sodium Batteries (ICNaB) 2025, Sydney, 10/9, 2025 (Invited).

M. Okubo "MXene for all solid state batteries" IEEE MXene Symposium 2025, Bratislava, 9/11, 2025 (Invited).
M. Okubo, A. Okazawa "Development of Redox Flow Batteries without Resource Constraints" 8th Workshop on Lithium Ion Battery and Next Generation Batteries, Sapporo, 8/28, 2025 (Invited).
M. Okubo "Strain-Free MXene Electrodes for All Solid-State Batteries" ACS Fall Meeting, Washington DC, 8/19, 2025 (Invited).
大久保将史 "リチウムイオン電池革新に向けた正極材料設計" 第15回CSJ化学フェスタ, 東京, 10/24, 2025 (Invited).
A. Okazawa, T. Kakuchi, K. Akahori, M. Okubo "Multi-Componentization of Active Materials Based on Coordination Compounds for Redox Flow Batteries" Materials Research Meeting (MRM) 2025, Yokohama, 12/11, 2025.
A. Watanabe, M. Fujita, K. Kawai, M. Okubo "MXene Nb ₂ CTx for Negative Electrode Materials of All-Solid-State Batteries" Materials Research Meeting (MRM) 2025, Yokohama, 12/11, 2025.
S. Kodama, A. Okazawa, M. Okubo "Highly Coordinated Iron Complexes for Active Materials of Aqueous Redox Flow Batteries" 10th Asian Conference on Coordination Chemistry (ACCC10) 2025, Hanoi, 10/25, 2025.
K. Akahori, A. Okazawa, M. Okubo "Iron-Terpyridine Complexes with Hydrophilic Side Chains as Catholytes for Aqueous Redox Flow Batteries" 10th Asian Conference on Coordination Chemistry (ACCC10) 2025, Hanoi, 10/25, 2025.
R. Ichikawa, Y. Igarashi, K. Kawai, A. Okazawa, M. Okubo "Controlling Crystallization of Prussian Blue Analogues for Sodium Ion Battery Cathode Materials" 10th International Conference on Sodium Batteries (ICNaB) 2025, Sydney, 10/8, 2025.
S. Lyu, C. C. Lin, D. Y. W. Yu, S. Kajiyama, M. Okubo "Surface Modification of O3-type Sodium Layered Oxides for Improvement of Safety of Sodium-Ion Batteries" 10th International Conference on Sodium Batteries (ICNaB) 2025, Sydney, 10/8, 2025.
R. Ichikawa, Y. Igarashi, K. Kawai, A. Okazawa, S. Kajiyama, M. Okubo "Morphological Control of Prussian Blue Analogues for Sodium-Ion Battery Cathodes" International Society of Electrochemistry, 76th Annual Meeting, Mainz, 9/11, 2025.
A. Okazawa, T. Kakuchi, K. Akahori, M. Okubo "Multi-Componentization of Active Materials for Redox Flow Batteries" International Society of Electrochemistry, 76th Annual Meeting, Mainz, 9/9, 2025.
M. Kawaguchi, A. Okazawa, M. Okubo "Stabilization of Anthraquinone Derivatives for Anolytes of Aqueous Redox Flow Batteries" International Society of Electrochemistry, 76th Annual Meeting, Mainz, 9/9, 2025.
A. Watanabe, M. Fujita, K. Kawai, M. Okubo "MXene Nb ₂ CTx for Negative Electrode Materials of All-Solid-State Batteries" International Society of Electrochemistry, 76th Annual Meeting, Mainz, 9/9, 2025.
宮崎達也, 梶山智司, 村上 諒, 南田充朝, 永田賢二, 吉川英樹, 大久保将史 "ベイズ推定を用いた電池内抵抗の時定数分布解析" 第51回固体イオニクス討論会, 東京, 11/26, 2025.
熊谷颯馬, 梶山智司, 大久保将史 "ナトリウムイオン電池負極材料への応用を志向した有機活物質の電極設計" 第51回固体イオニクス討論会, 東京, 11/27, 2025.
兄玉創志, 岡澤 厚, 大久保将史 "高配位鉄-クロム錯体系レドックスフロー電池の開発" 第66回電池討論会, 名古屋, 11/19, 2025.

岡澤 厚, 赤堀圭祐, 大久保将史 “タービジン鉄錯体を用いた水系フロー電池用の正極液開発” 第66回電池討論会, 名古屋, 11/19, 2025.
野村優貴, 川合航右, 藤田真輝, 山本和生, 平山 司, 大久保将史 “オペランド透過電子顕微鏡法によるMXene負極のLiイオン貯蔵過程の動的観察” 第66回電池討論会, 名古屋, 11/19, 2025.
渡辺 愛, 藤田真輝, 市川理乃, 川合航右, 梶山智司, 大久保将史 “全固体電池におけるMXene Nb ₂ CT _x の充放電特性評価” 第66回電池討論会, 名古屋, 11/19, 2025.
S. Lyu, C. C. Lin, D. Yu, S. Kajiyama, M. Okubo “Surface modification of O3-type sodium metal oxides for sodium-ion battery cathodes” 第66回電池討論会, 名古屋, 11/18, 2025.
小沼諒人, 矢口 寛, 梶山智司, 大久保将史, 小林玄器 “O3型NaMO ₂ (M=Fe, Ni, Mn) へのフッ化物表面修飾がサイクル特性に与える影響” 第66回電池討論会, 名古屋, 11/18, 2025.
市川理乃, 五十嵐優太, 川合航右, 岡澤 厚, 梶山智司, 大久保将史 “ナトリウムイオン電池正極への応用を志向したプルシアンブルー類似体の結晶化制御と電極特性評価” 第66回電池討論会, 名古屋, 11/18, 2025.
渡辺 愛, 藤田真輝, 川合航右, 大久保将史 “全固体電池への応用を目指したMXene Nb ₂ CT _x 負極の開発” 第26回化学電池材料研究会ミーティング, 東京, 6/11, 2025.
S. Lyu, C. C. Lin, D. Y. W. Yu, S. Kajiyama, M. Okubo “Surface modification of O3-type sodium layered oxides for sodium-ion battery cathodes” 第26回化学電池材料研究会ミーティング, 東京, 6/10, 2025.
市川理乃, 五十嵐優太, 川合航右, 岡澤 厚, 梶山智司, 大久保将史 “ナトリウムイオン電池正極への応用を目指したプルシアンブルー類似体の結晶化制御” 第26回化学電池材料研究会ミーティング, 東京, 6/10, 2025.
川合航右, 村上 諒, 南田充朝, 永田賢二, 吉川英樹, 大久保将史 “層状酸化物正極のサイクル劣化機構の解明における数理統計的アプローチ” 電気化学会 第92回大会, 東京, 3/20, 2025.
市川理乃, 五十嵐優太, 川合航右, 岡澤 厚, 梶山智司, 大久保将史 “ナトリウムイオン電池正極への応用を目指したプルシアンブルー類似体の結晶構造制御” 電気化学会 第92回大会, 東京, 3/18, 2025.
岡澤 厚, 川口桃佳, 川合航右, 大久保将史 “アントラキノン系レドックスフロー電池における側鎖の置換基効果” 電気化学会 第92回大会, 東京, 3/18, 2025.

研究員 勝藤 拓郎

モット・ハバード系TiO _x の角度分解光電子分光 日本物理学会 第80回年次大会 2025. 9. 16 一般
オルソフェライトSm _{0.7} Er _{0.3} FeO ₃ のメスバウアー分光 日本物理学会 第80回年次大会 2025. 9. 17 一般
スピネル型FeV _{2-x} Al _x O ₄ の軌道－スピン－歪結合 日本物理学会 第80回年次大会 2025. 9. 19 一般
BaV ₁₀ O ₁₅ の軌道秩序相転移における2相共存状態と磁性 日本物理学会 第80回年次大会 2025. 9. 19 一般

Sm _{1-x} Gd _x TiO ₃ の軌道－スピン結合 日本物理学会 第80回年次大会 2025. 9. 19 一般
軌道縮退を有するフラストレーション系BaV _{9.8} Ti _{0.2} O ₁₅ の弾性応答 日本物理学会 第80回年次大会 2025. 9. 19 一般
Coupling between orbital and spin degrees of freedom in Jahn-Teller ions for Co _{1-x} Fe _x V ₂ O ₄ The International Workshop on “Exotic Quantum Phases due to Unhappy Electrons” 2025. 11. 13 一般
Orbital-spin coupling and orbital fluctuation in perovskite titanates TJK24 (The 24th Taiwan-Japan-Korea Symposium on Strongly Correlated Electron System) 2026. 3. 6 Invited
価電子密度解析を用いたスピネル型酸化物AV ₂ O ₄ (A = Fe, Mn) の軌道状態の研究 日本物理学会 2026年春季大会 2026. 3. 24 一般

研究員 川田 宏之

Y. Shimamura, J. Shirasaka, T. Fujii, <u>H. Kawada</u> , A. Hosoi, Y. Inoue “Evaluation of tensile strength of multi-walled carbon nanotube by ultrasonication and in-situ tensile test in SEM” Joint-Symposium on Mechanics of Advanced Materials & Structures 2025 (JSMAMS2025), Kyoto, Japan, 28/11-1/12/2025. 一般
K. Nishi, T. Omori, T. Komori, A. Hosoi, N. Sugiura, <u>H. Kawada</u> “Role of matrix resin in delaying transverse crack growth in cross-ply CFRP laminates” The 3rd China-Korea-Japan Joint Symposium on Composite Materials 2025 (the 3rd CKJ-CM), 15294, Guangzhou, China, 22-24/11/2025. 一般
S. Takashiro, Y. Sugeno, A. Hosoi, <u>H. Kawada</u> “Influence of electropulsing on fatigue crack growth retardation in hot-work die steel” 2nd JSME International Conference on Materials & Processing (ICM&P 2025), 3J06, Guam, USA, 3-6/11/2025. 一般
T. Isogai, H. Saitoh, A. Hosoi, D. Tsunoda, H. Koshita, <u>H. Kawada</u> “Effects of material composition on fatigue properties of short aramid fiber reinforced plastics using hybrid non-destructive testing methods” 2nd JSME International Conference on Materials & Processing (ICM&P 2025), 1B12, Guam, USA, 3-6/11/2025. 一般
A. Hosoi, T. Saito, M. Sakanobe, <u>H. Kawada</u> “Crack-tip micro-bridging for enhancing interlaminar fracture toughness at the CF/PA6-aluminum alloy bonding interface” The 10th International Conference on Fatigue of Composites (ICFC10), Abstract p.46, Sapporo, Japan, 1-4/7/2025. 一般
R. Sano, I. Sumi, A. Hosoi, K. Kawahara, H. Matsutani, <u>H. Kawada</u> “Evaluation of resin design and fatigue life scatter of carbon fiber reinforced foam using non-destructive testing method” The 10th International Conference on Fatigue of Composites (ICFC10), Abstract p.10, Sapporo, Japan, 1-4/7/2025. 一般
松尾俊輝, 後藤蒼志郎, 今井康太, 細井厚志, 阿部 暉, 川田宏之 「超音波疲労試験における擬似等方CFRP積層板の疲労損傷に及ぼす自己発熱の影響」 日本機械学会 関東支部 第32期総会・講演会, GS0402, 日本大学駿河台キャンパス, 東京, 2026年3月9-10日. 一般
齋藤達明, 小澤朋生, 細井厚志, 川田宏之 「Al合金とCF/PEEK積層板の接合強度に及ぼす接合界面のレーザー加工構造の影響」 日本機械学会 関東支部 第32期総会・講演会, GS0409, 日本大学駿河台キャンパス, 東京, 2026年3月9-10日. 一般
坂本麗衣, 佐野隆人, 細井厚志, 足立健太郎, 松谷浩明, 川田宏之 「曲げ疲労負荷下におけるCFRP/CFRFハイブリッドパネルの損傷進展挙動の評価」 関東学生会 第65回学生会員卒業研究発表講演会, 531, 日本大学駿河台キャンパス, 東京, 2026年3月9日. 一般
佐野隆人, 坂本麗衣, 細井厚志, 河原康太, 松谷浩明, 川田宏之 「複合的非破壊計測を活用したCFRFの疲労損傷進展過程に基づく疲労寿命予測」 第17回日本複合材料会議 (JCCM-17), 1B-07, 立命館大学大阪いばらきキャンパス, 大阪, 2026年3月3-5日. 一般
大森智也, 小森達也, 西 耕平, 細井厚志, 杉浦直樹, 川田宏之 「疲労負荷下における高弾性繊維CFRPクロスプライ積層板のトランスバースクラック進展に及ぼす母材樹脂の影響」 第17回日本複合材料会議 (JCCM-17), 2C-04, 立命館大学大阪いばらきキャンパス, 大阪, 2026年3月3-5日. 一般

伊藤拓海, 郡司遼太郎, 熊谷駿介, 後藤康夫, 國友 晃, 細井厚志, <u>川田宏之</u> 「溶液紡糸CNT糸の強度発現機構: 実験と粗視化分子動力学法による解析」 第17回日本複合材料会議 (JCCM-17), 1B-08, 立命館大学大阪いばらきキャンパス, 大阪, 2026年3月3-5日. 一般
高村 駿, 脇 勇一朗, 角 侑樹, 杉浦直樹, 細井厚志, 川田宏之 「蒸気タービン用スラスト軸受摺動材としてのCF/PEEK複合材料の熱伝導率向上に向けた研究」 第17回日本複合材料会議 (JCCM-17), 1D-03, 立命館大学大阪いばらきキャンパス, 大阪, 2026年3月3-5日. 一般
高橋悠一郎, 上半宙輝, 菊池 舞, 鬼塚麻季, 小向拓治, 細井厚志, <u>川田宏之</u> 「NOLリング試験によるCFRPの疲労特性評価手法の検討」 第17回日本複合材料会議 (JCCM-17), 1D-04, 立命館大学大阪いばらきキャンパス, 大阪, 2026年3月3-5日. 一般
近藤 匠, 野口航希, 久保田勇希, 阿部圭佑, 宇田道正, 岸本克己, 細井厚志, <u>川田宏之</u> 「コスモコート処理を施したFB-SiC/SiC複合材料の高温酸化耐性評価」 第17回日本複合材料会議 (JCCM-17), 3C-04, 立命館大学大阪いばらきキャンパス, 大阪, 2026年3月3-5日. 一般
田辺和輝, 手嶋星尚, 久保田勇希, 阿部圭佑, 宇田道正, 細井厚志, <u>川田宏之</u> 「作製条件の異なる乾式紡糸SiC繊維における機械的特性と微細構造評価」 第17回日本複合材料会議 (JCCM-17), 3C-05, 立命館大学大阪いばらきキャンパス, 大阪, 2026年3月3-5日. 一般
坂廻遼 萌, 米谷華織, 齋藤達明, 細井厚志, <u>川田宏之</u> 「表面ナノ構造を有するアルミニウム合金とCF/PA6積層板の異種接合における層間破壊靱性向上機構の解明」 70th FRP CON-EX 2025, P-2, 秋葉原UDX, 東京, 2025年10月29-30日. 一般
佐野隆人, 坂本麗衣, 細井厚志, 川田宏之 「損傷発達モニタリングによるCFRPの疲労寿命特性のばらつきの実験的評価」 2025年度 第12回ZAIKENフェスタ, p.31, 早稲田大学各務記念材料技術研究所, 東京, 2025年10月23日. 一般
磯貝拓海, 細井厚志, <u>川田宏之</u> 「AFRPの疲労損傷発達挙動に及ぼす材料組成の影響」 2025年度 第12回ZAIKENフェスタ, p.30, 早稲田大学各務記念材料技術研究所, 東京, 2025年10月23日. 一般
川田宏之 「FRP70年の歩み～直近10年間の進展と今後および用途事例集～」 カーボンナノチューブとその複合材料 -総説-, pp.41, 10月, 2025
國友 晃, 後藤康夫, 川田宏之 「FRP70年の歩み～直近10年間の進展と今後および用途事例集～」 カーボンナノチューブとその複合材料 -強化プラスチック用強化繊維としてのCNT繊維-, pp.42, 10月, 2025
川田宏之 「加速する世界のエネルギー転換と日本洋上風力発電の照らす」未来を聞いて 強化プラスチック協会誌, pp.495, 12月, 2025

研究員 小林 正和

佐々木達也, 小林正和 Mo-AgGaTe ₂ 界面状態の改善によるAgGaTe ₂ 太陽電池の性能向上 [17p-K310-2] 第72回応用物理学会 春季学術講演会 (東京理科大学野田キャンパス) 2025年3月14日-17日
佐々木達也, 小林正和 AgGaTe ₂ 薄膜の膜厚増加に向けたGa昇華量の増加方法の検討 2025年 第86回応用物理学会 秋季学術講演会 2025.9.7-9.10 名城大学 [8a-N305-1]
T. Sasaki and M. Kobayashi Improvement of AgGaTe ₂ solar cell performance by improving Mo-AgGaTe ₂ interface state Compound Semiconductor Week 2025, P42, May 27-30, 2025 Banff, Canada
C. R. Forrester, S. Mohammadi, A. Barton, J. Moon, R. Miyazawa, M. Kobayashi, M. C. Tamargo Molecular Beam Epitaxy Growth and X-Ray Analysis of α and γ MnTe 39th North American Conference on Molecular Beam Epitaxy (NAMBE 2025) August 25-27, 2025, at the Hyatt Regency Tamaya Resort, Santa Ana Pueblo (Albuquerque, New Mexico) TuA-16
Y. A. Vázquez-Soto, J. Pérez-Saavedra, F. Sutar, I. H. Calderón, M. Kobayashi Low Temperature Growth of Ultra-Thin CdSe/ZnSe Quantum Wells 39th North American Conference on Molecular Beam Epitaxy (NAMBE 2025) August 25-27, 2025, at the Hyatt Regency Tamaya Resort, Santa Ana Pueblo (Albuquerque, New Mexico) MoP-43

研究員 下嶋 敦

Synthesis and unique properties of layered silica/silsesquioxane and polydimethylsiloxane nanocomposites 11th European Silicon Days, 2025年7月15日, 招待
ジメチルシラノール基を有するシロキサン分子をビルディングブロックとしたアルミノシリケートの合成 日本ゾルーゲル学会, 2025年7月24日, 一般
細孔径の異なるナノ多孔質ニオブ酸リチウムの合成と圧電触媒性能の比較 日本ゾルーゲル学会, 2025年7月24日, 一般
金属塩化物を前駆体に用いた酸化インジウムスズナノ多孔体の細孔径および組成の制御 日本ゾルーゲル学会, 2025年7月24日, 一般
ビス(トリエトキシシリル)ベンゼンの加水分解・縮合過程の制御によるフェニレン架橋かご型シロキサン分子の合成 日本ゾルーゲル学会, 2025年7月24日, 一般
ゲルマニウム置換かご型シリケートの形成過程の追跡とその有機シリル化 日本ゾルーゲル学会, 2025年7月24日, 一般
Synthesis of Quasi-Single Crystalline Nanoporous Iron Oxides using Metal Chloride as a Precursor International Conference on Nanospace Materials 2025 (ICNM6), 2025年8月1日, 招待
Sn Incorporation into Layered Octosilicates using Tin(IV) Chloride 14th Jilin-Korea-Waseda Alliance Annual Symposium, 2025年8月22日, 一般
ナノ多孔質金属酸化物を鋳型としたメソポーラスゼオライトの合成 第32回ゼオライト夏の学校, 2024年9月1日, 一般
Nanostructured Organosiloxane Materials with Self-healing Properties 5th International Conference on Nanomaterials for health, energy and environment (5-ICNM), 2025年9月8日, 招待
金属塩化物の気相拡散を利用したナノ多孔体内部での酸化インジウムスズの結晶成長 日本セラミックス協会 第38回秋季シンポジウム, 2025年9月17日, 一般
規則的な球状細孔を有するナノ多孔質石英の合成 日本セラミックス協会 第38回秋季シンポジウム, 2025年9月18日, 一般
チタンオキシクラスタールとかご型シロキサンの連結による3次元ナノ多孔体の作製 第15回CSJ化学フェスタ2025, 2025年10月22日, 一般
ヘテロ元素(Ge)を含むかご型シロキサン系ビルディングブロックの作製 第15回CSJ化学フェスタ2025, 2025年10月23日, 一般
ナノ多孔質酸化コバルトを鋳型としたメソポーラスベータゼオライトの合成とSi/Al比の制御 第15回CSJ化学フェスタ2025, 2025年10月23日, 一般
金属塩化物の揮発・酸化による単結晶性酸化インジウムスズナノ多孔体の合成および細孔径・組成の制御 2025年度 第12回ZAIKEN Festa, 2025年10月23日, 一般
チタンオキシクラスタールとかご型シロキサンをビルディングブロックとして用いたナノ多孔質材料の合成 2025年度 第12回ZAIKEN Festa, 2025年10月23日, 一般
環状テトラシロキサンのシリル化誘導体を用いた銅(II)含有シルセスキオキサンの合成 第29回ケイ素化学協会 シンポジウム, 2025年10月31日, 一般
ヘテロ原子サイトの環境が制御されたかご型シロキサン系化合物の合成 第29回ケイ素化学協会 シンポジウム, 2025年10月31日, 一般
骨格中にフェニレン基を有するかご型シルセスキオキサン分子の合成 第44回無機高分子研究討論会, 2025年11月13日, 一般
ジメチルシラノール基で修飾された環状シロキサンを用いた銅含有シルセスキオキサン分子の合成 第44回無機高分子研究討論会, 2025年11月13日, 一般
チタンオキシクラスタールとかご型シロキサンからなるナノ多孔体の合成 第44回無機高分子研究討論会, 2025年11月13日, 一般

酸化チタンナノ多孔体表面へのかご型シロキサン の被覆 第41回ゼオライト研究発表会, 2025年11月27日, 一般
ナノ多孔質金属酸化物を鋳型に用いたメソポーラスベータゼオライトの合成と Si/Al比およびメソ孔径の制御 第41回ゼオライト研究発表会, 2025年11月27日, 一般
Multilayered silisesquioxane-polydimethylsiloxane thin films with crack healing ability The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), 2025年12月15日, 一般
Precise Control of Ordered Nanoporous Inorganic Oxides using Silica Nanosphere Template The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), 2025年12月15日, 一般
Formation process of germanium-substituted cage silicate octamers and their functionalization by organosilylation The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), 2025年12月15日, 一般
Preparation of three-dimensionally ordered nanoporous iron oxides and their utilization as a scaffold for synthesizing Fe-containing MFI-type zeolites The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), 2025年12月16日, 一般
単結晶性酸化インジウム亜鉛ナノ多孔体の合成と後処理による細孔構造制御 日本セラミックス協会 2026年年会, 2026年 3 月 5 日, 一般
シリカナノ粒子集積体を鋳型およびSi源として用いた板状ナノ多孔質ビスマスシリケートの合成 日本セラミックス協会 2026年年会, 2026年 3 月 5 日, 一般
かご型シロキサン の頂点シリル基の分子内架橋によるアルコキシシリル基を有する多環式オリゴマーの合成 日本化学会 第106春季年会, 2026年 3 月19日, 一般
層状ケイ酸塩マガディアイトの Si-H末端オリゴジメチルシロキサンによる層間修飾と薄層化 日本化学会 第106春季年会, 2026年 3 月19日, 一般
Synthesis of Al-containing Siloxane-based Materials Using Silanol-modified Oligosiloxanes The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), 2025年12月15日, 一般
Silylation of cage gallophosphates encapsulating oxide anions The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), 2025年12月15日, 一般

研究員 菅原 義之

Nitrogen-doped carbon/CoFe nanoparticle/CoN composite with hierarchical meso-macro pores as an electrocatalyst for the oxygen reduction reaction 2025 PACRIM conference 2025. 5. 8, 一般
Hierarchically meso-macroporous N-doped carbon embedded with CoFe-based composite for the oxygen reduction reaction ACS Fall meeting 2025 2025. 8. 18, 一般
Evolution of CuCoFe prussian blue analogues with open nanoframe architectures for enhanced electrochemical capacitive deionization ACS Fall meeting 2025 2025. 8. 25, 一般
熱力学の実験器具を用いたデジタル教材の開発～教育DXによる理数の学びシステムの開発の1つとして～ 日本理科教育学会 第75回全国大会(富山大会), 2025. 8. 23, 一般
教育DXによる理数の学びシステムの開発と評価: 学びの質の変革を目指して 日本科学教育学会 第49回年会, 2025. 9. 7, 一般
Hollow-structured high-entropy metal sulfide for high-performance supercapacitors 《Synthesis, Process, Electrochemical performance》 一般社団法人粉体粉末冶金協会 2025年度秋季大会(第136回公演大会) 2025. 10. 29, 一般
Ultrathin high-entropy oxides regulated by Ga ₂ O ₃ layers for oxygen evolution reaction 《Synthesis, Process》 一般社団法人粉体粉末冶金協会 2025年度秋季大会(第136回公演大会) 2025. 10. 29, 一般
Synthesis of CaWN ₂ Using a High-Pressure Metathesis Reaction The 39 th International Korea-Japan Seminar on Ceramics, 2025. 11. 21, 一般
Synthesis of nanocomposite of octahedral molybdenum cluster and titania nanoparticle for water purification The 39 th International Korea-Japan Seminar on Ceramics, 2025. 11. 21, 一般

Preparation of semi-homogeneous catalyst using single and double-layered hexaniobate and Mn (Ⅲ) Salen complex The 39 th International Korea – Japan Seminar on Ceramics, 2025. 11. 21, 一般
Preparation of porous carbon with Fe-Co nanoparticles from polymeric precursors as electrocatalysts Pacifichem 2025, 2025. 12. 20, 招待
Preparation of double-layered nanosheets bearing silver nanoparticles in the interlayer 第64回セラミックス基礎科学討論会, 2026. 1. 10, 一般
Preparation of high-entropy alloy nanoparticles embedded in nitrogen-doped meso-macroporous carbon spheres for oxygen Reduction Reaction 第64回セラミックス基礎科学討論会, 2026. 1. 10, 一般
Synthesis of metal hydroxides as efficient electrocatalysts for oxygen evolution reaction 第64回セラミックス基礎科学討論会, 2026. 1. 10, 一般
高エントロピー金属硫化物 (Co, Ni, Cu, Zn, Mn, Pt) ₃ S ₄ 中空構造体の水素発生反応触媒特性 公益社団法人日本セラミックス協会 2026年年会, 2026. 3. 4, 一般
単一金属原子を埋め込んだ酸素還元反応のための炭窒化ホウ素 公益社団法人日本セラミックス協会 2026年年会, 2026. 3. 4, 一般
有機修飾したニオブ酸ナノシートの蛍光特性と芳香族化合物への応答 公益社団法人日本セラミックス協会 2026年年会, 2026. 3. 5, 一般
Dispersant-induced exfoliation of pristine HLaNb ₂ O ₇ ·xH ₂ O layered perovskite and its n-propoxy derivative using ultrasonication 公益社団法人日本セラミックス協会 2026年年会, 2026. 3. 5, 一般

研究員 鈴木 進補

椎木政人, Elke Sondermann, Andreas Meyer, 鈴木進補 透過X線とシアーセル法を用いた液体アルミニウム合金中における銅とケイ素の不純物拡散係数測定 軽金属学会 第148回春期大会 2025/5/17
徳永仁史, 若井悠貴, 佐藤直子, 瀬渡直樹, 梶野智史, 鈴木進補, 本山雄一, 岡根利光 粒子法によるPBF方式金属積層造形プロセスシミュレーション 日本鑄造工学会 第185回全国講演大会 2025/5/24
土田菜摘, 高松聖美, 門井浩太, 鈴木進補 球状化処理を施したAl-6.4%Si合金におけるセミソリッド状態までの溶融過程その場観察 日本鑄造工学会 第185回全国講演大会 2025/5/25
K. Kawashima, M. Shiinoki, Y. Kobayashi, and S. Suzuki Jump Behavior of Individual Atoms in Liquid Pb using Molecular Dynamics Simulation 21st Conference on Diffusion in Solids and Liquids 2025/6/24
C. Tabata, T. Maeda, T. Osada, S. Ozaki, K. Kawagishi, and S. Suzuki Finite Element Analysis of the nanoindentation tests for evaluating Al ₂ O ₃ /Ni-base substrate interfacial failure stress Thermec '2025 International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials 2025/6/30
N. Tsuchida, S. Takamatsu, K. Kadoi, and S. Suzuki In-Situ Observation of Refinement and Spheroidization Process of Primary Crystal in Al-6.4Si Alloy by SIMA process 6th International Conference on Light Materials 2025/7/8
Y. Kawakita, M. Shiinoki, T. Nishiyama, T. Kikuchi, and S. Suzuki Collective atomic dynamics of liquid bismuth International Conference on Neutron Scattering 2025 2025/7/9
田畑千尋, 宇多田悟志, 長田俊郎, 川岸京子, 原田広史, 鈴木進補 CaOるつぼ溶解によるNi基単結晶超合金中の不純物除去と無害化による耐酸化性向上メカニズム R054カーボンニュートラル実現のための耐熱材料委員会 2025/7/8
櫛舎祐太, 若井悠貴, 平沼拓也, 瀬渡直樹, 佐藤直子, Jodi Dennis, 鈴木進補 Laser Powder Bed FusionにおけるX線透過法と二色放射温度を用いた溶融挙動その場観察 第3回AM Worldセミナー 2025/7/18

S. Takamatsu, N. Tsuchida, and S. Suzuki Microstructure on Inner Surface of Cell Walls inside Aluminum Alloy Foam Fabricated via Semi-Solid Route 2025 the 14th International Conference on Engineering and Innovative Materials 2025/8/5
門井洸衛, 櫛舎祐太, 上野遥か, 市川文彩, 小林正和, 山田素子, 佐藤 尚, 渡辺義見, 中野 禅, 鈴木進補 国際宇宙ステーションの静電浮遊炉で微細化させたTiC添加Ti-6Al-4V中の結晶粒解析 日本マイクログラビティ応用学会 (JASMA) 主催 微小重力科学夏の学校2025 2025/8/10
櫛舎祐太, 門井洸衛, 上野遥か, 市川文彩, 山田素子, 佐藤 尚, 渡辺義見, 小山千尋, 織田裕久, 石川毅彦, 渡邊勇基, 鈴木進補 ISS-ELFの高速度カメラを用いたTi-6Al-4Vの局所的な結晶成長速度の解析手法 日本マイクログラビティ応用学会 (JASMA) 主催 微小重力科学夏の学校2025 2025/8/10
上野遥か, 門井洸衛, 櫛舎祐太, 市川文彩, 上田雄翔, 山田素子, 佐藤 尚, 渡辺義見, 鈴木進補 国際宇宙ステーションの静電浮遊炉で微細化させたTiC添加Ti-6Al-4V試料表面解析 日本マイクログラビティ応用学会 (JASMA) 主催 微小重力科学夏の学校2025 2025/8/10
市川文彩, 門井洸衛, 櫛舎祐太, 上野遥か, 山田素子, 佐藤 尚, 渡辺義見, 鈴木進補 静電浮遊炉で凝固したTi-6Al-4V試料中に添加したTiCヘテロ凝固核の3次元形状 日本マイクログラビティ応用学会 (JASMA) 主催 微小重力科学夏の学校2025 2025/8/10
的場 創, 若井悠貴, 門井洸衛, 大西正悟, 南 尚吾, 鈴木進補 レゴリスシミュラントの溶融凝固過程で形成する気泡の成分推定 日本マイクログラビティ応用学会 (JASMA) 主催 微小重力科学夏の学校2025 2025/8/10
土橋真紀, 大矢野静奈, 大野直樹, 田畑千尋, 高田裕治, 宇多田悟志, 長田俊郎, 川岸京子, 鈴木進補 真空誘導溶解中におけるNi基超合金への添加により不純物Siを除去可能な酸化物 日本マイクログラビティ応用学会 (JASMA) 主催 微小重力科学夏の学校2025 2025/8/10
秋山凜咲, 土橋真紀, 宇多田悟志, 長田俊郎, 川岸京子, 鈴木進補 廃棄タービンプレードの断面分析による運転中のガスタービンエンジン内部環境の推定 日本マイクログラビティ応用学会 (JASMA) 主催 微小重力科学夏の学校2025 2025/8/10
平沼拓也, 若井悠貴, 櫛舎祐太, 瀬渡直樹, 佐藤直子, ジョディデニス, 鈴木進補 X線透過法およびEPMAを用いたLaser Powder Bed Fusionにおけるスパッタ発生量と組成変化の関係解明 日本マイクログラビティ応用学会 (JASMA) 主催 微小重力科学夏の学校2025 2025/8/10
堀越晴貴, 椎木政人, 鈴木進補 分子動力学計算によるソーレ係数算出に向けた汎用ニューラルネットワークポテンシャル検証 日本マイクログラビティ応用学会 (JASMA) 主催 微小重力科学夏の学校2025 2025/8/10
川嶋啓太, 小林由央, 椎木政人, 鈴木進補 液体金属におけるジャンプ頻度による原子の自己拡散挙動評価 日本マイクログラビティ応用学会 (JASMA) 主催 微小重力科学夏の学校2025 2025/8/10
佐々木海夏翔, 椎木政人, 川嶋啓太, 鈴木進補 シアーセル法を用いた蛍光X線分析用Al-Cu合金の検量線作成 日本マイクログラビティ応用学会 (JASMA) 主催 微小重力科学夏の学校2025 2025/8/10
矢野峻吾, 澤田万尋, 鈴木進補 方向性ポーラス金属の宇宙利用に向けた機械的特性の予測 日本マイクログラビティ応用学会 (JASMA) 主催 微小重力科学夏の学校2025 2025/8/10
玻座真亜子, 矢野峻吾, 鈴木進補 ポーラス金属のヤング率と宇宙利用 日本マイクログラビティ応用学会 (JASMA) 主催 微小重力科学夏の学校2025 2025/8/10
M. Shiinoki, K. Kawashima, Y. Kobayashi, A. Yamanaka, and S. Suzuki Atomic radius dependence of impurity diffusion coefficients in liquid Pb 19th International Conference on Liquid and Amorphous Metals 2025/9/1
Y. Kushiya, Y. Wakai, T. Hiranuma, N. Seto, N. Sato, D. Jodi, Y. Watanabe, and S. Suzuki Effect of TiC heterogeneous nucleation site particles on the melting behavior of Ti-6Al-4V powder by in-situ X-ray and thermal imaging during laser powder bed fusion The 13th International Conference on Porous Metals and Metallic Foams (MetFoam 2025) 2025/9/2
T. Hiranuma, Y. Wakai, Y. Kushiya, N. Seto, N. Sato, D. Jodi, and S. Suzuki Evaluation of Spatter Generation and Compositional Changes of Hastelloy X during Laser Powder Bed Fusion using In-Situ X-ray Imaging and EPMA The 13th International Conference on Porous Metals and Metallic Foams (MetFoam 2025) 2025/9/2

Y. Wakai, Y. Kushiya, T. Hiranuma, N. Seto, N. Sato, D. Jodi, and S. Suzuki In-situ observation of periodic melting behavior in pure titanium powder during laser powder bed fusion The 13th International Conference on Porous Metals and Metallic Foams (MetFoam 2025) 2025/9/3
S. Yano, A. Hazama, M. Sawada, and S. Suzuki Formation of Deformation Bands in Porous Metals with Unidirectional Pores The 13th International Conference on Porous Metals and Metallic Foams (MetFoam 2025) 2025/9/3
N. Tsuchida, S. Takamatsu, K. Kadoi, and S. Suzuki In-situ observation of melting behavior with spherical primary crystals of Al-6.4mass%Si for semi-solid foaming The 13th International Conference on Porous Metals and Metallic Foams (MetFoam 2025) 2025/9/3
M. Shiinoki, T. Nishiyama, T. Kikuchi, Y. Kawakita, and S. Suzuki Structure analysis of liquid bismuth using molecular dynamics simulations 19th International Conference on Liquid and Amorphous Metals 2025/9/3
堀越晴貴, 椎木政人, 鈴木進補 ソーレ係数算出に向けた水/エタノール系の分子動力学計算 日本マイクログラビティ応用学会 第37回学術講演会 (JASMAC-37) 2025/9/11
上野遙か, 門井洸衛, 櫛舎祐太, 市川文彩, 上田雄翔, 山田素子, 佐藤 尚, 渡辺義見, 小林正和, 鈴木進補 ISS-ELFで溶融凝固させたTiC添加Ti-6Al-4V試料表面解析 日本マイクログラビティ応用学会 第37回学術講演会 (JASMAC-37) 2025/9/11
市川文彩, 門井洸衛, 櫛舎祐太, 上野遙か, 山田素子, 佐藤 尚, 渡辺義見, 鈴木進補 静電浮遊炉で溶融凝固したTi-6Al-4Vに添加したTiCヘテロ凝固核の解析 日本マイクログラビティ応用学会 第37回学術講演会 (JASMAC-37) 2025/9/11
的場 創, 若井悠貴, 門井洸衛, 大西正悟, 南 尚吾, 鈴木進補 レゴリスシミュラントの溶融凝固過程で発生する気泡成分の推定 日本マイクログラビティ応用学会 第37回学術講演会 (JASMAC-37) 2025/9/11
佐々木海夏翔, 椎木政人, 川嶋啓太, 鈴木進補 シアーセル法による蛍光X線分析用Al-Cu合金の標準試料作製 日本マイクログラビティ応用学会 第37回学術講演会 (JASMAC-37) 2025/9/11
川嶋啓太, 椎木政人, 小林由央, 鈴木進補 分子動力学法を用いた液体金属における原子の自己拡散挙動評価 日本マイクログラビティ応用学会 第37回学術講演会 (JASMAC-37) 2025/9/11
門井洸衛, 櫛舎祐太, 上野遙か, 市川文彩, 小林正和, 山田素子, 佐藤 尚, 渡辺義見, 中野 禪, 鈴木進補 ISS-ELFで溶融凝固させたTiC添加Ti-6Al-4V試料におけるSPRING-8のXRD-CTを用いた粒数推定 日本マイクログラビティ応用学会 第37回学術講演会 (JASMAC-37) 2025/9/13
椎木政人, 川嶋啓太, 小林由央, 山中亜理紗, 鈴木進補 分子動力学計算を用いた液体Pb中における不純物拡散係数の予測 日本マイクログラビティ応用学会 第37回学術講演会 (JASMAC-37) 2025/9/13
椎木政人, 西山隆之, 菊地龍弥, 川北至信, 鈴木進補 機械学習ポテンシャルによる液体Biの構造解析 日本物理学会 第80回年次大会 (2025年) 2025/9/16
玻座真亜子, 矢野峻吾, 鈴木進補 ポーラスアルミニウム合金の気孔配列変化におけるヤング率の推移 軽金属学会関東支部 2025年度 第11回若手研究者ポスター発表会 2025/9/22
加藤貴晃, 土田菜摘, 高松聖美, 門井浩太, 小林正和, 鈴木進補 傾斜冷却板を用いた鋳造により初晶を球状化したAl-6.4 mass%Siの溶融過程その場観察 軽金属学会関東支部 2025年度 第11回若手研究者ポスター発表会 2025/9/22
堀越晴貴, 椎木政人, 鈴木進補 ソーレ効果の宇宙実験と分子動力学シミュレーション 早稲田大学機航フェス☆2025 2025/9/24
大矢野静奈, 宇多田悟志, 田畑千尋, 池田亜矢子, 長田俊郎, 川岸京子, 鈴木進補 Ru量を低減させたTMS-238における有害相抑制可能な組成の推定 第53回日本ガスタービン学会 定期講演会 2025/10/8

門井洸衛, 櫛舎祐太, 上野遙か, 市川文彩, 小林正和, 山田素子, 佐藤 尚, 渡辺義見, 中野 禪, 鈴木進補 SPRING-8 でのX線回折による国際宇宙ステーションで溶融凝固させたTi-6Al-4V試料の粒数推定 第12回 ZAIKEN Festa 2025/10/23
高松聖美, 清山拓夢, 奥西優太, 土田菜摘, 鈴木進補 セミソリッド発泡法で作製した発泡アルミニウム合金セル壁上の水素分析 軽金属学会 第149回秋期大会 2025/11/9
土橋真紀, 大野直樹, 田畑千尋, 高田裕治, 宇多田悟志, 長田俊郎, 川岸京子, 鈴木進補 Ni基超合金リサイクルプロセスにおける不純物Si除去に効果的な酸化物の探索 日本学術振興会 R054カーボンニュートラル実現のための耐熱材料委員会 2025/11/10
秋山凜咲, 土橋真紀, 大矢野静奈, 宇多田悟志, 池田亜矢子, 田畑千尋, 川岸京子, 鈴木進補 使用済みNi基単結晶超合金タービンプレードにおける不純物濃化部の特定 日本学術振興会 R054カーボンニュートラル実現のための耐熱材料委員会 2026/3/2
櫛舎祐太, 若井悠貴, 平沼拓也, 瀬渡直樹, 佐藤直子, Jodi Dennis, 渡辺義見, 鈴木進補 X線透過法と二色放射測温法で可視化したLaser powder bed fusionにおけるTiCヘテロ凝固核の添加有無によるTi-6Al-4V粉末の溶融凝固挙動 日本学術振興会 R054カーボンニュートラル実現のための耐熱材料委員会 2026/3/2
門井洸衛, 櫛舎祐太, 上野遙か, 市川文彩, 小林正和, 山田素子, 佐藤 尚, 渡辺義見, 中野 禪, 鈴木進補 国際宇宙ステーションの静電浮遊炉でTiCヘテロ凝固核から形成させたTi-6Al-4Vの旧β粒数推定 日本学術振興会 R054カーボンニュートラル実現のための耐熱材料委員会 2026/3/2
堀越晴貴, 椎木政人, 鈴木進補 ソーレ効果の計算に向けた液体Al-Ag合金の分子動力学シミュレーション 日本機械学会 関東支部 第32期総会・講演会 2026/3/9
平沼拓也, 若井悠貴, 櫛舎祐太, 瀬渡直樹, 佐藤直子, Jodi Dennis, 鈴木進補 Hastelloy X粉末のPBF-LB/Mにおける下面凹凸形成過程のその場X線透過観察 日本金属学会 2026年春期(第178回)講演大会 2026/3/11
秋山凜咲, 土橋真紀, 大矢野静奈, 宇多田悟志, 池田亜矢子, 田畑千尋, 川岸京子, 鈴木進補 使用済みNi基単結晶超合金タービンプレードに存在する不純物の特定 日本金属学会 2026年春期(第178回)講演大会 2026/3/12
S. Oyano, S. Utada, C. Tabata, A. Ikeda, T. Osada, K. Kawagishi, and S. Suzuki Precipitation behavior of topologically closed-packed phases in TMS-238 at 1150°C 2026 TMS Annual Meeting & Exhibition 2026/3/19
矢野峻吾, 坂座真亜子, 鈴木進補 ポーラス金属における見かけのヤング率低下を引き起こすセル壁幾何学形状の推定 2026年塑性加工春季講演会 2026/3/19
椎木政人, 西村友希, 鈴木進補 Sauer-Freise法を用いた液体Sn-Pb合金における相互拡散係数の濃度分布解析 日本物理学会 2026年春季大会 2026/3/24 (オンライン開催)

研究員 関根 泰

関根 泰 カーボンニュートラルアップデート [依頼講演] 2026/3/27 企業内講演会
関根 泰 [依頼講演] 2026/2/20 京都 精製パネル討論会
関根 泰 グリーンLPGで高知をすみずみまで元気に [依頼講演] 2026/2/5 高知県庁講演会
関根 泰 カーボンニュートラルの現状 [依頼講演] 2026/1/26 企業内講演会

関根 泰 二酸化炭素の触媒的転換と地下反応への期待 [依頼講演] 2026/1/23 京都大学桂キャンパス 貯留二酸化炭素の利活用に関するシンポジウム
関根 泰 カーボンニュートラルの今後の方向性などについて [依頼講演] 2026/1/8 高知大学講演会
関根 泰 評価者の視点から見た挑戦 [依頼講演] 2025/12/9 早大講演会
関根 泰 トランジション期におけるエネルギー動向 [基調講演] 2025/11/19 大阪 DaigasGroup 講演会
関根 泰 放射光を用いたin-situ/オペランド分析による二酸化炭素転換触媒・材料の開拓 [依頼講演] 2025/11/12 東京品川 第12回 SPring-8 先端放射光技術による化学イノベーション研究会講演会
関根 泰 パネル講演 [依頼講演] 2025/11/12 東京国際フォーラム リム・エネルギー・アゴラシンポジウム
関根 泰 激動する世界情勢の中でこれからのカーボンニュートラルはどうなるか [基調講演] 2025/11/11 京都堀場製作所 HORIBA カーボンニュートラルセミナー 2025
関根 泰 Carbon dioxide conversion in an electric field at lower temperatures [Keynote 講演] 2025/11/2-4 台北 JST RETR9-TJSReC2 Symposium
関根 泰 Carbon dioxide conversion at lower temperatures using non-conventional process [依頼講演] 2025/10/28-29 ソウル Asian Symposium on Carbon Neutrality 2025
Y. Sekine Carbon dioxide conversion to carbon monoxide at lower temperatures [依頼講演] 2025/10/17 東北大 Colloquium for Innovative Catalysis by Leading Scientists in Asia
関根 泰 [パネラー] 2025/10/10 大阪万博 「2050年の社会とエネルギーの姿」にて山之内すず氏と共にパネラー
関根 泰 CNとプラネタリーバウンダリーと窒素循環, そして農業 [依頼講演] 2025/9/19 企業内講演会
関根 泰 グリーンイノベーションとトランジションのための技術の現状と今後 [依頼講演] 2025/9/16 大阪科学技術センター 産業界におけるカーボンニュートラル研究会講演会
Y. Sekine Hydrogen production by NH₃ decomposition at low temperatures assisted by surface protonics [学会] 2025/8/31-9/5 ノルウェートロンハイム EuropaCat 2025 - 16th European Congress on Catalysis Oral
K. Watanabe, T. Higo, K. Saegusa, S. Matsumoto, H. Sampei, Y. Isono, A. Shimojuku, H. Furusawa, Y. Sekine Ethylene production and CO₂ splitting via a chemical looping system utilizing lattice oxygen of redox-enhanced In₂O₃
T. Higo, Y. Sekine CO₂ conversion via reverse water gas shift chemical looping using indium-based oxide Poster
H. Sampei, K. Saegusa, K. Chishima, T. Higo, S. Tanaka, Y. Yayama, M. Nakamura, K. Kimura, Y. Sekine Accurate high-coverage surface modelling with annealing technology
K. Saegusa, K. Chishima, H. Sampei, J. G. Seo, Y. Sekine Electric Field-Controlled CO₂ Capture on Doped-CeO₂

K. Chishima, T. Masuda, H. Sampei, K. Saegusa, S. Hattori, Y. Sekine Efficient search for acetic acid synthesis pathway based on the bond disconnection process on Rh surface and Rh/metal oxide interface
H. Akiyama, K. Saegusa, H. Sampei, K. Maeda, T. Watanabe, S. Kado, H. Nakai, Y. Sekine Role of Strong Metal-Support Interaction in the Selective Hydrogenation of 4-Chloronitrobenzene
T. Masuda, T. Hikino, R. Umeda, A. Shimojima, Y. Sekine On-site reduction of Au ³⁺ ions and enhanced confinement effect of Au particles using novel porous support with abundant hydrosilyl groups
Y. Inoda, A. Shigemoto, C. Ukai, T. Higo, K. Oka, Y. Sekine NO _x -storage-reduction process in an electric field at low temperatures
Y. Sekine Low-temperature catalysis for environmental applications in an electric field [学会] 2025/8/4-7 シンガポール The 10th Asia-Pacific Congress on Catalysis (APCAT-10) Invited
T. Higo, J. Makiura, S. Kakihara, Y. Hirano, N. Ito, Y. Sato, Y. Sekine CO production from CO ₂ by reverse water-gas shift chemical looping using cobalt-modified indium oxide Oral
H. Sampei, K. Saegusa, K. Chishima, T. Higo, S. Tanaka, Y. Yayama, M. Nakamura, K. Kimura, Y. Sekine Fast search of stable molecular arrangement by the annealing technique
K. Watanabe, T. Higo, K. Saegusa, S. Matsumoto, H. Sampei, Y. Isono, A. Shimojuku, H. Furusawa, and Y. Sekine Chemical looping oxidative dehydrogenation of ethane combined with CO ₂ splitting on promoted In ₂ O ₃ oxygen carrier
T. Masuda, T. Hikino, R. Umeda, A. Shimojima, Y. Sekine Cage-siloxane-based porous supports functionalized with metal-reducing groups into the entire framework
M. Hayashi, Y. Ofuchi, K. Mitarai, S. Doi, K. Saegusa, H. Sampei, T. Higo, and Y. Sekine Hydrogen production by NH ₃ decomposition at low temperatures assisted by surface protonics
T. Mizuguchi, H. Sampei, M. Nakamura, K. Kimura, and Y. Sekine Multidimensional Quantum Fourier Transform for Nanosheet Material Evaluation by Electron Microscopy Poster
R. Nakayama, R. Maeda, H. Sampei, Y. Koshizuka, T. Higo, Y. Bando, T. Komanoya, Y. Nakahara, Y. Sekine Effect of CeO ₂ Support with Controlled Crystallinity on the Ammonia Synthesis Reaction in an Electric Field
K. Kuroki, K. Sugiura, T. Higo, N. Matsumoto, H. Tedzuka, Y. Sekine Lean and humid methane combustion at low temperatures using Pd/CZO catalysts in an electric field
K. Shima, R. Yamano, S. Ogo, T. Higo, and Y. Sekine Non-conventional low-temperature reverse water gas shift reaction over highly dispersed Ru catalysts in an electric field
T. Ikeda, K. Saegusa, Y. Sekine Controlling CO ₂ capture ability by an electric field over CeO ₂
関根 泰 カーボンニュートラルの国内外動向 [依頼講演] 2025/7/28 企業内講演会
関根 泰 次世代燃料・化学におけるグリーンイノベーションの国内外動向 [依頼講演] 2025/7/10 企業内講演会
Y. Sekine Low-temperature catalytic chemical looping dry-reforming of methane [講演] 2025/6/23-27 ポルトガル 25nd ICCDU
Y. Sekine Effective conversion of CO ₂ at lower temperatures in an electric field [学会] 2025/6/2-5 イタリア 13th International Conference on Environmental Catalysis
Y. Inoda, A. Shigemoto, C. Ukai, T. Higo, K. Oka, Y. Sekine NO _x storage and reduction system with an electric field at low temperature
K. Chishima, T. Masuda, H. Sampei, K. Saegusa, S. Hattori, Y. Sekine Efficient search for acetic acid synthesis pathway based on the bond disconnection process on Rh surface and Rh/metal oxide interface

K. Watanabe, T. Higo, K. Saegusa, S. Matsumoto, H. Sampei, Y. Isono, A. Shimojuku, H. Furusawa, Y. Sekine Oxidative dehydrogenation of ethane combined with CO ₂ splitting via chemical looping technique utilising redox of In ₂ O ₃
K. Saegusa, T. Higo, S. Ishizaki, S. Kakiyama, H. Sampei, Y. Sekine Theoretical Design of CeO ₂ -Based Materials for Enhanced RWGS-CL Performance
T. Higo, A. Shigemito, Y. Inoda, C. Ukai, K. Mitarai, Y. Sekine N ₂ O decomposition using an electric-field-assisted catalysis at low temperatures
関根 泰 エネルギー・環境問題とカーボンニュートラル [依頼講演] 2025/6/3 JEMIMA (日本電気計測器工業会) 講演会
関根 泰 カーボンニュートラル動向 [依頼講演] 2025/5/26 企業内講演会
K. Chishima, T. Masuda, H. Sampei, K. Saegusa, S. Hattori, Y. Yayama, Y. Sekine Efficient Acetic Acid Synthesis Pathway Exploration on Rh Surface and Rh/Metal Oxide Interface [学会] 2025/5/19-23 米子 The 20th Japan-Korea Symposium on Catalysis
Y. Inoda, A. Shigemoto, C. Ukai, T. Higo, K. Oka, Y. Sekine NO _x Storage and Reduction System with an Electric Field under Lean Burn Conditions
T. Masuda, T. Hikino, R. Umeda, A. Shimojima, Y. Sekine Confinement of Au Nanoparticles in Cage-Siloxane-based Porous Materials via Onsite Reduction
H. Akiyama, K. Saegusa, H. Sampei, K. Maeda, T. Watanabe, S. Kado, H. Nakai, Y. Sekine Selective Hydrogenation of 4-Chloronitrobenzene Using Strong Metal-Support Interaction
M. Hayashi, Y. Ofuchi, S. Doi, K. Mitarai, K. Kawabe, Y. Sekine Hydrogen Production by NH ₃ Decomposition at Low Temperatures Using the Electric Field Catalysis
C. U. Lee, B. Koo, Y. Sekine, J. G. Seo NH ₃ Decomposition Reaction on the Ni, and Ru-exsolved Catalysts
N. Kayama, K. Kang, T. Higo, C. Sampson, Y. Sekine Syngas Production via Chemical Looping Dry Reforming of Methane over Ru/La ₂ Ce ₂ O ₇ at Low Temperature
K. Watanabe, T. Higo, K. Saegusa, S. Matsumoto, H. Sampei, Y. Isono, A. Shimojuku, H. Furusawa, Y. Sekine Utilization of In ₂ O ₃ Bulk Redox for Ethylene Formation Combined with CO ₂ Splitting via Chemical Looping
K. Saegusa, H. Sampei, K. Chishima, T. Higo, M. Nakamura, K. Kimura, Y. Sekine Quantum Annealing Boosts Prediction of High-coverage Adsorption on the Catalyst Surface
J. G. Seo, Y. S. Kang, N. C. Arriola Jr., Y. Sekine Reactive Capture and Conversion of CO ₂ under Electric Field
T. Higo, A. Shigemoto, C. Ukai, Y. Inoda, K. Mitarai, Y. Sekine Low-temperature N ₂ O Decomposition on Rh ₂ O ₃ Catalyst in an Electric-field
T. Masuda, T. Hikino, R. Umeda, A. Shimojima, Y. Sekine Incorporation of highly dispersed Au nanoparticles within the porous cage siloxane-based materials [学会] 2025/5/11-14 スペイン International Conference Gold 2025
Y. Sekine Green-Sustainable Chemistry, Energy and Environment [依頼講演] 2025/4/29 ソウル 梨花女子大講演会
Y. Sekine Heterogeneous catalytic hydrogen production and CO ₂ conversion at lower temperatures [依頼講演] 2025/4/28 ソウル Hanyang大講演会

研究員 多辺 由佳

新倉 征, 興野菜摘, 多辺由佳 “コレステリック液晶滴のLehmann回転: ゲル化による効果” 2025年度 日本液晶学会討論会, 京都, 9月10-12日, 2025年
伊賀大貴, 多辺由佳 “トラン型液晶の混合による誘起相の発現とその発光特性” 2025年度 日本液晶学会討論会, 京都, 9月10-12日, 2025年

研究員 平田 秋彦

Dual medium-range order structures in $Zr_{80}Pt_{20}$ metallic glasses The 17th International Conference on the Physics of Non-Crystalline Solids, 2025. 8. 11, (一般)
Cluster homology analysis of topological short range order in $Cu_{64}Zr_{36}$ metallic glass The 17th International Conference on the Physics of Non-Crystalline Solids, 2025. 8. 11, (一般)
Analysis of approximants for the icosahedral quasicrystal by using a density-wave model The 17th International Conference on the Physics of Non-Crystalline Solids, 2025. 8. 11, (一般)
局所電子回折計算による $Cu_{64}Zr_{36}$ 金属ガラスにおける中距離秩序構造の抽出 日本金属学会 2025年秋期 (第177回) 講演大会, 2025. 9. 17, (一般)
液体Cuにおける分子動力学法と逆モンテカルロ法による構造モデルの検討 日本金属学会 2025年秋期 (第177回) 講演大会, 2025. 9. 17, (一般)
アモルファスGeの高分解能像における特徴的コントラストの解析 日本金属学会 2025年秋期 (第177回) 講演大会, 2025. 9. 17, (一般)
密度波モデルによる 1/1 近似結晶 $(Al, Zn)_{49}Mg_{32}$ の解析 日本金属学会 2025年秋期 (第177回) 講演大会, 2025. 9. 18, (一般)
Cu-Zr 二元系金属ガラスにおける短距離秩序のトポロジック的特徴 日本金属学会 2025年秋期 (第177回) 講演大会, 2025. 9. 18, (一般)
$Zr_{80}Pt_{20}$ 金属ガラスにおける中距離秩序構造の観察 日本金属学会 2025年秋期 (第177回) 講演大会, 2025. 9. 18, (一般)
$Zr_{80}Pt_{20}$ 金属ガラスにおける中距離秩序構造の高分解能像観察 日本顕微鏡学会 第68回シンポジウム, 2025. 11. 13, ポスター
密度波モデルによる20面体準結晶から 1/1 近似結晶への状態変化の理解 日本金属学会 2026年春期 (第178回) 講演大会, 2026. 3. 12, (一般)
$Zr_{80}Pt_{20}$ 金属ガラスにおける原子コラム構造の形成 日本金属学会 2026年春期 (第178回) 講演大会, 2026. 3. 12, (一般)
Cu-Zr 金属ガラスにおける原子クラスターのトポロジック的秩序と空間分布 日本金属学会 2026年春期 (第178回) 講演大会, 2026. 3. 12, (一般)

研究員 細井 厚志

Y. Shimamura, J. Shirasaka, T. Fujii, H. Kawada, A. Hosoi, Y. Inoue Evaluation of tensile strength of multi-walled carbon nanotube by ultrasonication and in-situ tensile test in SEM Joint-Symposium on Mechanics of Advanced Materials & Structures 2025 (JSMAMS 2025), Kyoto, Japan, 28/11-1/12/2025. 一般
K. Nishi, T. Omori, T. Komori, A. Hosoi, N. Sugiura, H. Kawada Role of matrix resin in delaying transverse crack growth in cross-ply CFRP laminates The 3rd China-Korea-Japan Joint Symposium on Composite Materials 2025 (the 3rd CKJ-CM), 15294, Guangzhou, China, 22-24/11/2025. 一般
S. Takashiro, Y. Sugeno, A. Hosoi, H. Kawada Influence of electropulsing on fatigue crack growth retardation in hot-work die steel 2nd JSME International Conference on Materials & Processing (ICM&P 2025), 3J06, Guam, USA, 3-6/11/2025. 一般

T. Isogai, H. Saitoh, A. Hosoi, D. Tsunoda, H. Koshita, H. Kawada Effects of material composition on fatigue properties of short aramid fiber reinforced plastics using hybrid non-destructive testing methods 2nd JSME International Conference on Materials & Processing (ICM&P 2025), 1B12, Guam, USA, 3-6/11/2025. 一般
A. Hosoi, T. Saito, M. Sakanobe, H. Kawada Crack-tip micro-bridging for enhancing interlaminar fracture toughness at the CF/PA6-aluminum alloy bonding interface The 10th International Conference on Fatigue of Composites (ICFC10), Abstract p.46, Sapporo, Japan, 1-4/7/2025. 一般
R. Sano, I. Sumi, A. Hosoi, K. Kawahara, H. Matsutani, H. Kawada Evaluation of resin design and fatigue life scatter of carbon fiber reinforced foam using non-destructive testing method The 10th International Conference on Fatigue of Composites (ICFC10), Abstract p.10, Sapporo, Japan, 1-4/7/2025. 一般
A. Hosoi Effect of interface microstructure on interlaminar fracture toughness in dissimilar joints of thermoplastic CFRP and aluminum alloys the 39th Conference and 32nd Symposium of the International Committee on Aeronautical Fatigue and Structural Integrity (ICAF 2025), Xi'an, China, 9-12/6/2025. 一般
笹川昌暉, 細井厚志, 国吉ニルソン 「シランカップリング剤と炭素繊維強化熱可塑性プラスチックとの結合形成の理論的解析」 日本化学会 第106回春季年会, F1234-lvn-01, 日本大学船橋キャンパス, 千葉, 2026年3月17-20日. 一般
松尾俊輝, 後藤蒼志郎, 今井康太, 細井厚志, 阿部 暉, 川田宏之 「超音波疲労試験における擬似等方CFRP積層板の疲労損傷に及ぼす自己発熱の影響」 日本機械学会 関東支部 第32期総会・講演会, GS0402, 日本大学駿河台キャンパス, 東京, 2026年3月9-10日. 一般
齋藤達明, 小澤朋生, 細井厚志, 川田宏之 「Al合金とCF/PEEK積層板の接合強度に及ぼす接合界面のレーザー加工構造の影響」 日本機械学会 関東支部 第32期総会・講演会, GS0409, 日本大学駿河台キャンパス, 東京, 2026年3月9-10日. 一般
坂本麗衣, 佐野隆人, 細井厚志, 足立健太郎, 松谷浩明, 川田宏之 「曲げ疲労負荷下におけるCFRP/CFRPハイブリッドパネルの損傷進展挙動の評価」 関東学生会 第65回学生会卒業研究発表講演会, 531, 日本大学駿河台キャンパス, 東京, 2026年3月9日. 一般
佐野隆人, 坂本麗衣, 細井厚志, 河原康太, 松谷浩明, 川田宏之 「複合的非破壊計測を活用したCFRPの疲労損傷進展過程に基づく疲労寿命予測」 第17回日本複合材料会議 (JCCM-17), 1B-07, 立命館大学大阪いばらきキャンパス, 大阪, 2026年3月3-5日. 一般
大森智也, 小森達也, 西 耕平, 細井厚志, 杉浦直樹, 川田宏之 「疲労負荷下における高弾性繊維CFRPクロスプライ積層板のトランスバースクラック進展に及ぼす母材樹脂の影響」 第17回日本複合材料会議 (JCCM-17), 2C-04, 立命館大学大阪いばらきキャンパス, 大阪, 2026年3月3-5日. 一般
伊藤拓海, 郡司遼太郎, 熊谷駿介, 後藤康夫, 國友 晃, 細井厚志, 川田宏之 「溶液紡糸CNT糸の強度発現機構: 実験と粗視化分子動力学法による解析」 1B-08, 立命館大学大阪いばらきキャンパス, 大阪, 2026年3月3-5日. 一般
高村 駿, 脇 勇一郎, 角 侑樹, 杉浦直樹, 細井厚志, 川田宏之 「蒸気タービン用スラスト軸受摺動材としてのCF/PEEK複合材料の熱伝導率向上に向けた研究」 1D-03, 立命館大学大阪いばらきキャンパス, 大阪, 2026年3月3-5日. 一般
高橋悠一郎, 上半宙輝, 菊池 舞, 鬼塚麻季, 小向拓治, 細井厚志, 川田宏之 「NOLリング試験によるCFRPの疲労特性評価手法の検討」 1D-04, 立命館大学大阪いばらきキャンパス, 大阪, 2026年3月3-5日. 一般
近藤 匠, 野口航希, 久保田勇希, 阿部圭佑, 宇田道正, 岸本克己, 細井厚志, 川田宏之 「コスモコート処理を施したFB-SiC/SiC複合材料の高温酸化耐性評価」 3C-04, 立命館大学大阪いばらきキャンパス, 大阪, 2026年3月3-5日. 一般
中村優作, 田辺和輝, 手嶋星尚, 久保田勇希, 阿部圭佑, 宇田道正, 細井厚志, 川田宏之 「作製条件の異なる乾式紡糸SiC繊維における機械的特性と微細構造評価」 3C-05, 立命館大学大阪いばらきキャンパス, 大阪, 2026年3月3-5日. 一般
坂邊 萌, 米谷華織, 齋藤達明, 細井厚志, 川田宏之 「表面ナノ構造を有するアルミニウム合金とCF/PA6積層板の異種接合における層間破壊靱性向上機構の解明」 70th FRP CON-EX 2025, P-2, 秋葉原UDX, 東京, 2025年10月29-30日. 一般
佐野隆人, 坂本麗衣, 細井厚志, 川田宏之 「損傷発達モニタリングによるCFRPの疲労寿命特性のばらつきの実験的評価」 2025年度 第12回ZAIKEN フェスタ, p.31, 早稲田大学各務記念材料技術研究所, 東京, 2025年10月23日. 一般

磯貝拓海, 細井厚志, 川田宏之
「AFRPの疲労損傷発達挙動に及ぼす材料組成の影響」
2025年度 第12回 ZAIKEN フェスタ, p. 30, 早稲田大学各務記念材料技術研究所, 東京, 2025年10月23日. 一般

研究員 柳谷 隆彦

T. Yanagitani “Polarization inverted ScAlN piezoelectric multilayer RF filters” The 2025 International Meeting for Future of Electron Devices (IMFEDK), 2025年11月13日 招待講演
T. Yanagitani “Polarization Inverted Piezoelectric Multilayer for BAW Filter Application” IEEE International Microwave Filter Workshop (IMFW), 2026年 2 月 7 日 招待講演
C. Mita, Y. Shimano, and T. Yanagitani “New method for evaluating intrinsic mechanical Q factor of ScAlN, GaN, metal films by GHz ultrasonic pulse-echo technique” The 23rd International Conference on Solid-State Sensors, Actuators and Microsystems (Transducers), 2025年 6 月30日～7 月 3 日
Y. Hidaka, S. Kinoshita, Y. Shimano, and T. Yanagitani “BAW Transformer for Rectenna Using 12-layer Polarization Inverted Structure” The 23rd International Conference on Solid-State Sensors, Actuators and Microsystems (Transducers), 2025年 6 月30日～7 月 3 日
Y. Hidaka, S. Matsumura, N. Ono, Y. Shimano, and T. Yanagitani “SAW Excitation by Solid Flat Electrode on Periodically Polarization Inverted Structure for Novel RF Filter” The 23rd International Conference on Solid-State Sensors, Actuators and Microsystems (Transducers), 2025年 6 月30日～7 月 3 日
A. Hanai, and T. Yanagitani “Polarity controlled sputtering growth of AlN films for second-order mode polarization inverted double layer SMRs” International IEEE Ultrasonic Symposium (IUS), 2025年 9 月15日～18日
A. Hanai, N. Shimazaki, and T. Yanagitani “GHz BAW resonators using depletion layers of GaN and SiC semiconductor single crystals” International IEEE Ultrasonic Symposium (IUS), 2025年 9 月15日～18日
M. Matsumura, C. Mita, Y. Shimano, and T. Yanagitani “Estimation of shear wave mechanical Qm factor in AlN and ScAlN films using pulse-echo method” International IEEE Ultrasonic Symposium (IUS), 2025年 9 月15日～18日
C. Mita, and T. Yanagitani “A new method for evaluating intrinsic mechanical quality factor Qm of bulk materials using input impedance modulated GHz pulse-echo technique” International IEEE Ultrasonic Symposium (IUS), 2025年 9 月15日～18日
C. Mita, and T. Yanagitani “Relationship between intrinsic mechanical quality factor and crystalline orientation and grain structure investigated using GHz pulse-echo technique” International IEEE Ultrasonic Symposium (IUS), 2025年 9 月15日～18日
N. Shimazaki, and T. Yanagitani “Correlation between Qm, TCV, and FT-IR spectra of sputter-deposited SiO2 films evaluated by GHz pulse-echo technique” International IEEE Ultrasonic Symposium (IUS), 2025年 9 月15日～18日
N. Shimazaki, and T. Yanagitani “New method for directly estimating temperature coefficient of velocity (TCV) of material alone using pulse-echo technique” International IEEE Ultrasonic Symposium (IUS), 2025年 9 月15日～18日
N. Suzuki, and T. Yanagitani “Quasi-shear mode c-axis tilted epitaxial PbTiO3 FBAR fabricated using off-angle MgO sacrifice substrate” International IEEE Ultrasonic Symposium (IUS), 2025年 9 月15日～18日
N. Suzuki, W. Shimoyama, and T. Yanagitani “Polarization-inverted Sc0.4Al0.6N double-layer SMR” International Ultrasonic Symposium (IUS), 2025年 9 月15日～18日
Y. Hidaka, C. Zhang, and T. Yanagitani “Improvement of kt2 of (K, Na) NbO3 epitaxial thin films by applying DC bias” International IEEE Ultrasonic Symposium (IUS), 2025年 9 月15日～18日

Y. Hidaka, S. Matsumura, N. Ono, and T. Yanagitani “SAW resonator based on solid flat electrode and periodically polarization inverted ScAlN thin films” International IEEE Ultrasonic Symposium (IUS), 2025年 9 月15日～18日
Y. Imai, M. Suzuki, Y. Shimano, and T. Yanagitani “Liquid sensor application using acoustic energy confinement of 30-layer polarization inversion resonator” International IEEE Ultrasonic Symposium (IUS), 2025年 9 月15日～18日
Y. Imai, I. Endo, A. Katsumata, and T. Yanagitani “A piezoelectric micromachined ultrasonic transducer based on 40% ScAlN thick films without MEMS technology” International Ultrasonic Symposium (IUS), 2025年 9 月15日～18日
C. Mita, and T. Yanagitani “Mechanical Qm factor of bulk crystal plate measured by GHz pulse-echo technique with modulated input impedance” Acoustical Society of America and Acoustical Society of Japan Sixth Joint Meeting, 2025年12月 1 日～ 5 日
C. Mita, Y. Shimano, and T. Yanagitani “Intrinsic mechanical quality factor Qm of thin films evaluated by the GHz ultrasonic pulse-echo technique” Acoustical Society of America and Acoustical Society of Japan Sixth Joint Meeting, 2025年12月 1 日～ 5 日
N. Shimazaki, and T. Yanagitani “A novel pulse-echo method for direct measurement of the temperature coefficient of velocity (TCV) in thin solid films” Acoustical Society of America and Acoustical Society of Japan Sixth Joint Meeting, 2025年12月 1 日～ 5 日
N. Shimazaki, and T. Yanagitani “Investigation of the correlation between mechanical quality factor Qm and temperature coefficient of acoustic velocity TCV in sputtered-deposited SiO2 thin films” Acoustical Society of America and Acoustical Society of Japan Sixth Joint Meeting, 2025年12月 1 日～ 5 日
Y. Wada, Q. Lu, N. Shimazaki, and T. Yanagitani “Four-layer polarity inverted ZnO piezoelectric thin film for bulk acoustic wave resonator” Acoustical Society of America and Acoustical Society of Japan Sixth Joint Meeting, 2025年12月 1 日～ 5 日
Y. Wada, N. Shimazaki, and T. Yanagitani “A method for evaluating the temperature coefficient of frequency of piezoelectric thin film without removing substrate” Acoustical Society of America and Acoustical Society of Japan Sixth Joint Meeting, 2025年12月 1 日～ 5 日
C. Mita, Y. Shimano, and T. Yanagitani “Mechanical Q factor of piezoelectric films and metal films evaluated by pulse-echo technique” IEEE International Microwave Filter Workshop (IMFW), 2026年 2 月 7 日～ 9 日
Y. Wada, N. Suzuki, W. Shimoyama, and T. Yanagitani “Second overtone mode solidly mounted resonators using polarization-inverted Sc0.4Al0.6N thin films” IEEE International Microwave Filter Workshop (IMFW), 2026年 2 月 7 日～ 9 日
島崎奈々, 柳谷隆彦 「パルスエコー法による圧電薄膜および金属薄膜の音速温度係数TCV評価」 第54回EMシンポジウム, 2025年 6 月17日～18日
島崎奈々, 柳谷隆彦 「パルスエコー法によるSiO2 薄膜の機械的Qm値と音速温度係数TCVの相関評価」 第54回EMシンポジウム, 2025年 6 月17日～18日
鈴木菜々海, 下山 航, 柳谷隆彦 「転写技術を用いた二次モードSc0.4Al0.6N分極反転2層SMR」 第54回EMシンポジウム, 2025年 6 月17日～18日
味田このの, 柳谷隆彦 「GHzパルスエコー法による減衰測定によるバルク単結晶基板の機械的Q値評価」 第54回EMシンポジウム, 2025年 6 月17日～18日
小田 航, 今井優希, 鈴木基嗣, 島野耀康, 柳谷隆彦 「分極反転層の音響エネルギー閉じ込めを利用したBAW型液体センサ応用」 日本機械学会 2025年度年次大会, 2025年 9 月 7 日～10日
日高悠一郎, 松村理司, 島野耀康, 柳谷隆彦 「周期的分極反転ScAlN薄膜とベタ電極からなるSAWデバイス」 日本機械学会 2025年度年次大会, 2025年 9 月 7 日～10日

和田悠都, 茂木彩音, 柳谷隆彦 「複素反射率法を用いた生体物質間反応の検出」 日本機械学会 2025年度年次大会, 2025年9月7日～10日
花井彩香, 柳谷隆彦 「スパッタ法によるガス比によるAlN薄膜の極性制御と二次モード分極反転共振子の作製」 第86回応用物理学会 秋季学術講演会, 2025年9月7日～10日
張 創昇, 内田拓希, 島野耀康, 柳谷隆彦 「(K, Na) NbO₃ スパッタエピタキシャル薄膜の直流バイアスによるkt^2 値の向上」 第86回応用物理学会 秋季学術講演会, 2025年9月7日～10日
鈴木菜々海, 下山 航, 柳谷隆彦 「分極反転Sc_{0.4}Al_{0.6}N薄膜を用いた二次モードSMR」 弾性波素子技術コンソーシアム 第20回総会/研究会, 2025年10月7日
柳谷隆彦, 島崎奈々 「パルスエコー法を用いた薄膜材料の音速温度係数TCVの評価手法」 弾性波素子技術コンソーシアム 第20回総会/研究会, 2025年10月7日
島崎奈々, 柳谷隆彦 「スパッタSiO₂ 薄膜における機械的Q_m値と音速温度係数TCVの相関の評価」 弾性波素子技術コンソーシアム 第20回総会/研究会, 2025年10月7日
味田ここの, 柳谷隆彦 「パルスエコー法による減衰測定を用いたバルク基板の機械的品質係数Q_m値評価」 弾性波素子技術コンソーシアム 第20回総会/研究会, 2025年10月7日
Lu Qichen, 島崎奈々, 島野耀康, 柳谷隆彦 「RFスパッタ法によるMgZnO分極反転多層共振子の作製」 電子情報通信学会 超音波研究会, 2025年10月22日
遠藤 樹, 柳谷隆彦 「MEMS技術を用いない低周波帯用ScAlN厚膜pMUT」 電子情報通信学会 超音波研究会, 2025年10月22日
花井彩香, 柳谷隆彦 「ガス比調整によるAlN薄膜の極性制御に基づく三層分極反転AlN SMRの作製」 電子情報通信学会 超音波研究会, 2025年10月22日
N. Shimazaki, and T. Yanagitani “Correlation of Q_m and TCV of SiO₂ sputter films investigated by GHz pulse-echo technique” The 46th Symposium on Ultrasonic Electronics (USE), 2025年11月12日～14日
C. Mita, Y. Shimano, and T. Yanagitani “Evaluation of mechanical Q factor of piezoelectric films and metal films by pulse-echo technique” The 46th Symposium on Ultrasonic Electronics (USE), 2025年11月12日～14日
I. Endo, and T. Yanagitani “A piezoelectric micromachined ultrasonic transducer based on 40% ScAlN thick films without MEMS technology” The 46th Symposium on Ultrasonic Electronics (USE), 2025年11月12日～14日
A. Hanai, and T. Yanagitani “Polarization control of AlN growth using sputtering gas ratio and application to third overtone mode SMR” The 46th Symposium on Ultrasonic Electronics (USE), 2025年11月12日～14日
N. Suzuki, W. Shimoyama, and T. Yanagitani “High overtone mode SMR using polarization-inverted Sc_{0.4}Al_{0.6}N thin films” The 46th Symposium on Ultrasonic Electronics (USE), 2025年11月12日～14日
張 創昇, 内田拓希, 島野耀康, 味田ここの, 柳谷隆彦 「スパッタエビ法による(K, Na) NbO₃ 薄膜・厚膜トランスデューサの作製と直流バイアスによる高kt^2 値の実現」 電子情報通信学会 超音波研究会, 2025年12月18日～19日
富岡美咲, 島崎奈々, 柳谷隆彦 「ScAlN/AlN多層ブラッグ反射型音響共振子における直流バイアス特性」 電子情報通信学会 超音波研究会, 2025年12月18日～19日

松村桃佳, 味田ここの, 島野耀康, 柳谷隆彦 「GHz帯の横波パルスエコー法を用いたScAlNおよびAlN圧電薄膜の横波Q値推定」 電子情報通信学会 超音波研究会, 2025年12月18日～19日
曲 健緯, 味田ここの, 島野耀康, 柳谷隆彦 「GHz帯パルスエコー法を用いたMgZnO膜の機械的品質係数Q _m 評価」 電子情報通信学会 超音波研究会, 2025年12月18日～19日
今井優希, Lu Qichen, 島崎奈々, 島野耀康, 柳谷隆彦 「オフaxisもしくはオンaxis RFスパッタ法により極性制御されたMgZnO分極反転多層共振子」 圧電材料・デバイスシンポジウム2026, 2026年1月22日～23日
味田ここの, 張 創昇, 柳谷隆彦 「ScAlN薄膜より励振された超音波を用いた直流電界印加中のKNNエビ薄膜のQ _m の測定」 圧電材料・デバイスシンポジウム2026, 2026年1月22日～23日
丸茂優太, 味田ここの, 柳谷隆彦 「GHz帯パルスエコー法による音響減衰測定を用いたバルク単結晶の機械的Q _m 値評価」 圧電材料・デバイスシンポジウム2026, 2026年1月22日～23日
和田悠都, 島崎奈々, 小田 航, 柳谷隆彦 「基板付き圧電薄膜共振子(HBAR)の電磁結合信号を用いた圧電薄膜のTCFの抽出」 圧電材料・デバイスシンポジウム2026, 2026年1月22日～23日
島崎奈々, 柳谷隆彦 「スパッタSiO ₂ 薄膜におけるTCVとQ _m 値, XRDハローピークの相関」 圧電材料・デバイスシンポジウム2026, 2026年1月22日～23日
谷口大介, 花井彩香, 柳谷隆彦 「スパッタガス比によるAlN薄膜の極性反転連続成長と10層分極反転共振子」 圧電材料・デバイスシンポジウム2026, 2026年1月22日～23日
小堀ひなた, 日高悠一郎, 島崎奈々, 柳谷隆彦, 木村 俊, 下地規之 「MOCVDエビ薄膜とスパッタ薄膜を組み合わせた分極反転2層AlN薄膜共振子」 圧電材料・デバイスシンポジウム2026, 2026年1月22日～23日
日高悠一郎, 島崎奈々, 柳谷隆彦 「周期的分極反転ScAlNとベタ電極を用いたIDTレスのトランスバーサル型フィルタ」 圧電材料・デバイスシンポジウム2026, 2026年1月22日～23日
鈴木菜々海, 下山 航, 柳谷隆彦 「犠牲層エッチングを用いたScAlNおよびKNNエビ薄膜共振子」 圧電材料・デバイスシンポジウム2026, 2026年1月22日～23日
大野直輝, 柳谷隆彦 「GHz帯AlN薄膜共振子フィルタの電極フレーム構造を用いた不要信号抑制のFEM解析」 電子情報通信学会 マイクロ波研究会, 2026年3月5日～6日
小田 航, 島崎奈々, 柳谷隆彦 「強誘電体材料の分極反転を用いたフレネル型平面音響レンズの設計」 第73回応用物理学会 春季学術講演会, 2026年3月15日～18日
勝又彩馨, 柳谷隆彦 「Sc _{0.4} Al _{0.6} Nバッファ層を用いたSc _{50%} 添加Sc _{0.5} Al _{0.5} N圧電薄膜の成長」 第73回応用物理学会 春季学術講演会, 2026年3月15日～18日

研究員 山口 勉功

非鉄冶金研究の醍醐味 非鉄冶金の重要性と将来性に関するシンポジウム, 2025.9.26, 招待
Na ₂ B ₄ O ₇ フラックスを用いた電動車モータからのレアアースの分離回収 資源・素材学会 2026年度春季大会, 2026.3.5, 招待
1773 KにおけるFeO _x 系スラグと溶銅間の白金族金属の分配挙動 資源・素材学会 2026年度春季大会, 2026.3.7, 一般

B ₂ O ₃ 系スラグを用いた酸化精製による銅からの鉄、ニッケル、錫の除去 資源・素材学会 資源・素材2025 (札幌), 2025.9.3, 一般
1350℃におけるAl ₂ O ₃ -TiO _x -CaO-SiO ₂ 系スラグと溶鉄間のIrまたはRuの分配挙動 資源・素材学会 資源・素材2025 (札幌), 2025.9.3, 一般
Nd ₂ O ₃ -Al ₂ O ₃ -SiO ₂ -Na ₂ B ₄ O ₇ 系状態図に基づいた電動車モータからのレアアースの分離・回収 資源・素材学会 資源・素材2025 (札幌), 2025.9.3, 一般
計算化学による廃リチウムイオン電池の熱処理における正極材とAl箔の界面反応と機械的強度の研究 資源・素材学会 資源・素材2025 (札幌), 2025.9.3, 一般
溶融Mg, Bi, PbによるTb-Fe合金からのTbの抽出 資源・素材学会 資源・素材2025 (札幌), 2025.9.4, 一般
RE _x O _y -CaO-Al ₂ O ₃ -SiO ₂ 系スラグを用いた電動車モータからのレアアースの分離・回収 資源・素材学会 資源・素材2025 (札幌), 2025.9.4, 一般
Al ₂ O ₃ -CaO-SiO ₂ 系スラグと溶銅間の白金族金属の分配に及ぼすCoの影響 日本金属学会 2025年秋期講演大会, 2025.9.17, 一般
回転炉におけるCu ₂ O系スラグの酸化 日本金属学会 2025年秋期講演大会, 2025.9.17, 一般

研究員 山本 知之

T. Koikawa, Y. Shimazaki, M. G. Brik, T. Yamamoto Development of Efficient Up-conversion Oxide Phosphors TIM25 Physics Conference, May 29-31, 2025, Timisoara, Romania
T. Koikawa, Y. Shimazaki, T. Yamamoto Up-conversion luminescence behavior of Er-doped oxides 248th ECS Fall Meeting, October 12-16, 2025, Chicago, USA
T. Yamamoto Machine learning studies for optical materials 3rd Silk Road Conference on Luminescent Materials and Devices: ECS-LDM, November 20-23, Chongqing, China
T. K. Ly, N. H. Chau, T. Yamamoto A Causal Inference Approach to Assess the Effects of Atomic Concentration Changes on the Hardness of High-Entropy Alloys 17th International Conference on Computational Collective Intelligence, November 12-15, 2025, Ho Chi Minh, Vietnam
S. Osaki, K. Hoshitani, M. Nakamura, K. Kimura, T. Yamamoto Advantages of Quantum Circuit Learning for the Development of High Entropy Materials IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering – QCE25, August 31- September 5, 2025, Albuquerque, USA
T. Koikawa, Y. Shimazaki, M. G. Brik, T. Yamamoto Change in Intensity Distribution of Up-Conversion Luminescence Spectra of CaIn ₂ O ₄ : Er 8th International Conference on Advanced Electromaterials, November 25-28, 2025, Jeju, Korea
S. Osaki, K. Hoshitani, M. Nakamura, K. Kimura, T. Yamamoto Evaluation of Predictive Performance by Quantum Circuit Learning for the Mechanical Properties of High Entropy Alloys 8th International Conference on Advanced Electromaterials, November 25-28, 2025, Jeju, Korea
Y. Niimiya, S. Hiromoto, T. Yamamoto Effect of Al Concentration on the Corrosion Behavior of Oxide Film-free Metal Surfaces in Mg Alloys 8th International Conference on Advanced Electromaterials, November 25-28, 2025, Jeju, Korea
A. Kishi, R. Wada, N. Shibayama, M. Ikegami, T. Miyasaka, T. Yamamoto Stabilization of alpha-FAPbI ₃ Film by Isobutylammonium Chloride Addition Materials Research Meeting 2025, December 8-13, 2025, Yokohama, Japan
A. Kishi, R. Wada, N. Shibayama, M. Ikegami, T. Miyasaka, T. Yamamoto Development of Highly Efficient FAPbI ₃ Perovskite Solar Cells by the Addition of Isobutylammonium Chloride 2025 MRS Fall Meeting, November 30 – December 5, 2025, Boston, USA

S. Osaki, K. Hoshitani, M. Nakamura, K. Kimura, N. Itani, T. Yamamoto Predictions of the Mechanical Properties of High Entropy Alloys Using Quantum Circuit Learning 第35回日本MRS年次大会, 2025/11/10-12, 北九州
K. Hoshitani, S. Osaki, T. Yamamoto Phase Classification of High Entropy Perovskites Using Machine Learning 第35回日本MRS年次大会, 2025/11/10-12, 北九州
A. Ichimaru, K. Kakiuchi, S. Osaki, T. Yamamoto Prediction of Luminescence Intensity of Ca-Al-Zn Oxide Red Phosphors 第35回日本MRS年次大会, 2025/11/10-12, 北九州
森本拓実, 河鱈一彦, 山本知之 尺骨骨折治癒過程における骨伝導音測定による固有振動数の変化 日本機械学会 スポーツ工学・ヒューマンダイナミクス部門講演会2025, 2025/11/28-30, 京都
垣内健太郎, 山本知之 Ca-Al-Zn系酸化物赤色蛍光体の発光特性評価 日本セラミックス協会 第38回秋季シンポジウム, 2025/9/17-19, 群馬
鯉川智生, 永田将義, 嶋崎結子, Mikhail G. Brik, 山本知之 Er添加CaSnO ₃ とCaTiO ₃ のアップコンバージョン発光波長分布 日本セラミックス協会 第38回秋季シンポジウム, 2025/9/17-19, 群馬
森本拓実, 河鱈一彦, 廣田音奏, 石川芽生子, 山本知之 機械学習を用いた骨強度予測モデルの検討 日本機械学会 第37回バイオエンジニアリング講演会, 2025/5/24-25, 神奈川
森本拓実, 河鱈一彦, 廣田音奏, 石川芽生子, 山本知之 深層学習モデルを用いた骨伝導音測定における固有振動数の推測手法の検討 第46回バイオメカニクス学術講演会, 2025/11/15-16, 奈良
岸 絢那, 和田僚平, 柴山直之, 池上和志, 宮坂 力, 山本知之 塩化イソブチルアンモニウム添加FAPbI ₃ ペロブスカイト太陽電池の評価 第86回応用物理学会 秋季学術講演会, 2025/9/7-10, 愛知
森本拓実, 河鱈一彦, 廣田音奏, 石川芽生子, 山本知之 骨伝導音を用いた骨強度測定の新たな評価法の検討 日本機械学会 2025年度年次大会, 2025/9-7-10, 北海道
福田涼介, 土井康太郎, 廣本祥子, 山本知之 高強度Al合金の局部腐食発生に及ぼすCu, Fe含有金属間化合物の影響 第72回材料と環境討論会, 2025/10/29-31, 愛知
嶋田 翔, 廣本祥子, 山本知之 炭酸アパタイト被膜の被覆時間が疑似体液中での純Mgの耐食性に及ぼす影響 第72回材料と環境討論会, 2025/10/29-31, 愛知
新宮やよい, 廣本祥子, 山本知之 AZ系Mg合金新生面の分極挙動に及ぼすAl濃度の影響 日本金属学会 第177回秋季講演大会, 2025/9/17-19, 北海道
嶋崎結子, 鯉川智生, 山本知之 希土類共添加CaSnO ₃ への炭酸アルカリ金属添加がアップコンバージョン発光特性に及ぼす影響 日本金属学会 第177回秋季講演大会, 2025/9/17-19, 北海道
嶋田 翔, 廣本祥子, 山本知之 TEM観察による純Mg表面での炭酸アパタイト被膜の形成メカニズムの検討 日本金属学会 第177回秋季講演大会, 2025/9/17-19, 北海道
新宮やよい, 廣本祥子, 山本知之 生理食塩水中でのAZ系Mg合金のAl濃度が新生金属面のアノード分極挙動に及ぼす影響 材料と環境討論会2025, 2025/6/4-6, 東京
福田涼介, 土井康太郎, 廣本祥子, 山本知之 Cuを含んだ金属間化合物が及ぼす高強度Al合金の腐食発生への影響 材料と環境討論会2025, 2025/6/4-6, 東京

4. 特許

研究員 鈴木 進補

川岸京子, 原田広史, 横川忠晴, 田畑千尋, 前澤裕俊, 埋橋 淳, 大久保忠勝, 高田裕治, 鈴木進補
Sbによる耐酸化性の劣化を予防したNi基超合金の製造方法, Sbによる耐酸化性の劣化を予防したNi基超合金部材
特許番号: 07810472, 登録日: 2026-01-26

プロジェクト研究（共同研究）

菅原 義之 研究室	90
本間 敬之 研究室	91
門間 聰之 研究室	92
山口 勉功 研究室	93

菅原義之研究室

2025年度は、モリブデン6核クラスタとセリアナノ粒子との複合体を作製し、これを用いた有害有機化合物の分解について検討した。複合体の形成は、透過型電子顕微鏡観察等から明らかにした。また、アルゴンで飽和させた、モリブデン6核クラスタ水分散液とモリブデン6核クラスタ/セリアナノ粒子複合体の水分散液の蛍光寿命を測定したところ、モリブデン6核クラスタ/セリアナノ粒子複合体の蛍光寿命が非常に短かった。一方、モリブデン6核クラスタ/セリアナノ粒子複合体の蛍光寿命を空気で飽和させた分散液で測定したところ、アルゴンで飽和させた分散液と類似していた。これらの結果は、光励起された電子

が、セリアの伝導帯に移動したためと考えられた。そこで、モリブデン6核クラスタ/セリア複合体を用いた有害物質、ビスフェノールSの分解挙動を調査した。ビスフェノールSを水に溶解させたあと、モリブデン6核クラスタ/セリアナノ粒子複合体を分散させ、擬似太陽光を照射したところ、ビスフェノールSの濃度は照射時間とともに大きく減少した。モリブデン6核クラスタ/セリアナノ粒子複合体がセリアナノ粒子のみを用いた場合に比べて高い活性を示したことから、セリアの伝導帯の電子と水の反応で生じた活性酸素種（ROS）が関与した光触媒反応が有害有機化合物の分解に有効であることが推定された。

本間敬之研究室

次世代蓄電池用負極として着目される亜鉛 (Zn) のサイクル特性を向上させる事を目的に、特に放電反応において電極表面を被覆し不活性化させる不働態層の形成を抑制する事が可能な、電解液中添加剤の設計に向けた方針策定に寄与する作用機構解析に取り組んだ。インピーダンス計測を含む電気化学測定やin-situラマン分光法、また第一原理計算など、界面反応解析を可能とする複数種の測定・解析手法を組み合わせることで検討した。まず多くの添加剤種の特性を評価した結果、不働態層形成を抑制するための添加剤として数種を特定できた他、中でもケイ酸イオン (SiO_3^{2-}) の効果が高いと特定された。その不働態層形成抑制メカニズムをラマン分光法と第一原理計算により解析した結果、 SiO_3^{2-} が示す電極表面への吸着や、溶解Zn種への相互作用が重要な役割を果たしていることが示唆された。具体的に、まずZnはその放電反応によっ

て $[\text{Zn}(\text{OH})_4]^{2-}$ として溶解し、その一部がZnOとして表面上に堆積するが、この堆積は放電初期から生じており、その放電初期に生じたZnOに対して SiO_3^{2-} は高い吸着性を示すことで、ZnO堆積に必要となる $[\text{Zn}(\text{OH})_4]^{2-}$ の表面吸着を抑制すると考えられた。また SiO_3^{2-} は溶液中に溶出した $[\text{Zn}(\text{OH})_4]^{2-}$ を安定化させてその溶解度や拡散性を高め、その結果ZnOの析出自体を抑制すると示唆された。これらのメカニズムを論文としてまとめ採択に至った (“Synergetic Effect of Silicate Addition on Modifying Zincate Solvation and Regulating ZnO Formation Revealed by in situ Raman Observation During Zn Discharging”, T. Wang, M. Kunimoto, K. Yokota, T. Homma, *Energy & Environ. Mater.*, in press)。この知見は、次世代蓄電池の設計に重要な指針を与えるものである。

門間聰之研究室

全固体フッ化物電池の材料評価は現在主に圧粉セル，すなわち粉体を積層した電池セルで行われているが，実用化を見据えると電極や電解質層の塗工プロセスによるフルセル作製が必須となる。本テーマでは2025年度，塗工プロセスを適用した電池セルの実現に向けて，活物質，導電助剤，バインダーの組成を種々検討し塗工法による正極層，電解

質層，負極層の形成プロセスを開発した。このプロセスをもとに，フルセル作製をみすえ，Cu正極換算で2Ah級全固体フッ化物電池が見込める電池構造（電極サイズ，積層数）をBi正極，PbSnF₄ 対極から成る半電池をモデルとして実証した。

山口勉功研究室

電動車両に搭載されているモータの多くにはネオジム磁石が使用されており、希少資源の有効活用の観点からネオジム磁石に含まれるレアアースの回収とそのリサイクルが求められている。報告者らはレアアース酸化物のフラックスとして $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$ を使用することを試みてきた。しかしながら、 $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$ フラックスには排水基準が存在するホウ素を含むため、環境負荷の低減を考慮すると、ホウ素を含有しないフラックスが望まれる。そこで、本研究では電動車のモータからのレアアース回収を行ううえで、ホウ素を含有しないフラックスとしてCaOを用いて実験を実施した。はじめに試薬により固体Fe飽和で Nd_2O_3 -CaO- Al_2O_3 - SiO_2 系スラグの均一融体の組成範囲を調べた。次いで電動車のロータとステータを使用して、磁石中のレアアースを RE_xO_y -CaO- Al_2O_3 - SiO_2 系スラグとして分離するとともに、シュウ酸沈殿法によりレアアース酸化物を回収可能か調べた。

はじめに試薬を用いて実験を行った。一例として日産自動車製モータのロータとステータを処理した場合の Nd_2O_3 、 Al_2O_3 、 SiO_2 の濃度比の試料全量に対して10 mass% CaOを添加し、1400℃で保持後、急冷した試料の

断面写真、SEMによる組織およびXRDの結果を図1に示す。これらの結果からモータAのロータ+ステータでは9 - 13 mass%CaOとなるようにCaOを添加すると均一液相となることが分かった。

試薬を用いた実験の結果に基づき、日産自動車製モータのロータとステータに対して100 kg溶解可能な高周波誘導炉を用い、CaOをフラックスとしてロータに含まれるネオジム磁石中のレアアースを RE_xO_y -CaO- Al_2O_3 - SiO_2 系スラグ相として回収可能か検証実験を実施した。その結果、CaOフラックスを用いた RE_xO_y -CaO- Al_2O_3 - SiO_2 系スラグにより、ロータ中のレアアースをスラグ相に回収できることが分かった。また、レアアース含有スラグに湿式法を適用することで、Nd, Pr, Dy, Tb酸化物の混合酸化物の濃度が98 mass%のレアアース混合酸化物を回収することが可能であった。

本研究により、CaOフラックスを用いた電動車モータからのレアアースを回収する方法は、従来の $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$ フラックスを用いた方法と同様に、高純度のレアアース酸化物を回収することが可能であることが分かった。

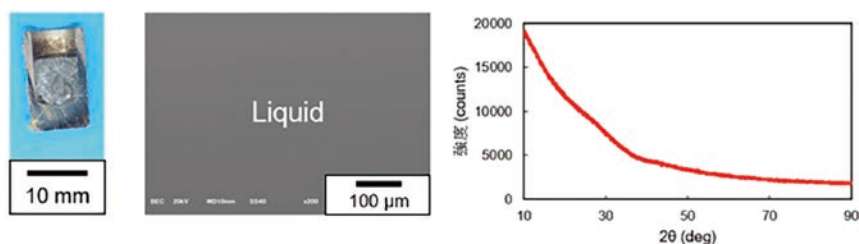


図1 9 mass%CaO-21 mass% Nd_2O_3 -16 mass% Al_2O_3 -54 mass% SiO_2 試料の断面写真および、SEM画像、XRD結果(1400℃)

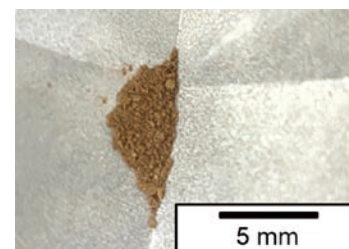


図2 モータから回収されたレアアース酸化物

共同利用・共同研究拠点

2025年度

「環境整合材料基盤技術共同研究拠点」事業報告 96

2025年度

「環境整合材料基盤技術共同研究拠点」成果報告 105

共同利用・共同研究拠点「環境整合材料基盤技術共同研究拠点」事業報告

1. はじめに（文部科学省ホームページより抜粋 https://www.mext.go.jp/a_menu/kyoten/）

共同利用・共同研究拠点 Joint Usage / Research Center 概要

我が国の学術研究の発展には、個々の大学の枠を越えて大型の研究設備や大量の資料・データ等を全国の研究者が共同で利用したり、共同研究を行う「共同利用・共同研究」のシステムが大きく貢献してきました。共同利用・共同研究は、従来、国立大学の全国共同利用型の附置研究所等を中心に推進されてきましたが、我が国全体の学術研究の更なる発展のためには、国公立大学を問わず大学の研究ポテンシャルを活用し、研究者が共同で研究を行う体制を整備することが重要です。

このため、文部科学省では、科学技術・学術審議会学術分科会研究環境基盤部会の報告を踏まえ、平成20年7月に、学校教育法施行規則を改正し、国公立大学を通じたシステムとして、新たに文部科学大臣による共同利用・共同研究拠点の認定制度を設けました。

本制度の実施により、広範な研究分野にわたり、共同利用・共同研究拠点が形成されるなど、我が国の学術研究の基盤強化と新たな学術研究の展開が期待されます。

2. 事業の目的

各務記念材料技術研究所はこれまで

- ① 幅広い材料の基盤技術に関する先導的な学術的研究拠点としての役割
- ② 多数の先端的な分析装置や試料作製装置の保有と、多数のスタッフによる管理・共同利用の運営
- ③ 幅広い材料分野の研究者・技術者との情報・ノウハウの共有とネットワークの構築

という特徴を持った研究所として活動してきた。

このような蓄積を生かしつつ、新たに「環境整合材料分野」に特化した研究所として生まれ変わり、

- (a) 環境に優しい構造材料・機能性材料の基盤技術およびその材料物性の学理を確立し、革新的な環境整合材料の創製を目指す。
- (b) 様々な材料分野の研究者に対して、環境整合材料の研究テーマの基に共同研究・共同利用を推進し、その中で材料技術研究所の設備・装置、およびそれらの操作のノウハウを提供することによって、我が国における材料創製と評価に関する基盤技術の発展に大きく寄与する。
- (c) 様々な材料分野の研究者に対して、環境整合材料の観点から学術的な交流の場を提供し、材料技術に関する異分野融合を積極的に推進する。

3. 拠点の全体計画

本研究拠点で実施される環境整合材料研究は、上記の「長寿命化」「リサイクル」「省エネルギー」の3つの方向性に基づいて行われる。具体的な研究テーマの例は、以下の通りである。

(1) 長寿命

- ・様々な材料の疲労・劣化機構をミクロ・マクロな観点から解明し、材料の長寿命化を達成する
- ・様々なプロセス技術・合成技術を用いて、長寿命材料を創製する
- ・損傷治癒技術や自己修復機能により老朽化した材料の長寿命化を図る

(2) リサイクル

- ・製品となった材料から希少元素のリサイクルを行う技術を開発する
- ・生分解性材料などの「環境にやさしい」材料を開発する
- ・分離・吸着機能を有する材料を開発し、有害物質除去・リサイクルへ応用する

(3) 省エネルギー

- ・構造材料を軽量化・強靱化することによって省エネルギーに資する
- ・エナジーハーベスティングを目指した新規熱電・圧電素子を開発する
- ・超省電力の半導体デバイスを開発する
- ・新しい蓄電池の開発と評価を行い、再生可能エネルギーを用いる発電の平準化に資する

これら研究テーマが縦糸であるのに対して、横糸としての研究グループとして

- ① 「環境整合構造材料・プロセス」グループ
- ② 「環境整合機能性材料」グループ

③「環境整合材料物性」グループ

を設置し、それぞれの研究手法を用いて各テーマを研究する。さらに、環境整合材料全般についての解析、評価を行い、長寿命、リサイクル、省エネルギーそれぞれの評価度因子の確立を目指すためのグループとして

④「環境整合材料の設計・評価」グループをおく。

各グループの研究員が公募に基づく共同研究を受入れることによって、研究テーマを縦糸とした異分野間の融合（横糸）によるシナジー効果を積極的に推進する。これにより、環境に整合した構造材料と機能性材料の基盤技術、および材料物性科学の学理を確立し、革新的な環境整合材料の創製を目指す。

4. 事業の運営

〔共同利用・共同研究拠点運営委員会〕

各務記念材料技術研究所所長のもとに材料技術研究所共同利用・共同研究拠点運営委員会（以下運営委員会と省略）を置く。運営委員会は本研究所に所属する学内委員5名、関連する研究コミュニティから学外委員5名により構成されるものとし以下の事項を審議する。なお委員構成の特徴として、学外委員には企業の研究者も含むものとする。運営委員会の役割は以下の通りである。

- (1) 共同利用・共同研究拠点の運営に関する事項
- (2) 共同利用・共同研究の企画、公募及び採択に関する基本方針
- (3) 共同利用・共同研究の成果公表に関する基本方針
- (4) 研究コミュニティとの情報収集・情報発信に関する事項
- (5) その他共同利用・共同研究拠点に関する重要事項

年5回開催

2025年度	第1回	2025年4月25日（金）	メールによる持ち回り
2025年度	第2回	2025年7月24日（木）	メールによる持ち回り
2025年度	第3回	2025年10月14日（火）	15：30～Zoom利用によるオンライン会議
2025年度	第4回	2026年1月20日（火）	10：00～Zoom利用によるオンライン会議
2025年度	第5回	2026年3月30日（月）	メールによる持ち回り

〔共同利用・共同研究拠点実行委員会〕

運営委員会のもと共同利用・共同研究課題の公募、採択、成果の評価・公開等を円滑に実行するため、共同利用・共同研究拠点実行委員会（以下「実行委員会」と省略）を設置する。実行委員会は本研究所に所属する学内委員4名、関連する研究コミュニティから学外委員4名により構成される。実行委員会は、運営委員会より材料技術研究所所長に答申された共同利用・共同研究拠点の運営方針に沿って以下の事項を審議する。

- (1) 共同研究における重点課題に関する事項
- (2) 共同利用・共同研究課題の公募に関する事項
- (3) 共同利用・共同研究課題の採択に関する事項
- (4) 共同利用・共同研究課題の成果評価、報告および公表に関する事項
- (5) その他共同利用・共同研究の実施に関する事項

年4回開催

2025年度	第1回	2025年4月3日（木）	15：30～Zoom利用によるオンライン会議
2025年度	第2回	2025年7月31日（木）	メールによる持ち回り
2025年度	第3回	2025年10月28日（火）	15：00～Zoom利用によるオンライン会議
2025年度	第4回	2026年1月27日（火）	13：00～Zoom利用によるオンライン会議

その他、共同利用申請等に対し電子決裁で対応した。

5. 事業の実績

- (1) 材料科学連続セミナーの実施 ※2024年度からの新たな取り組み

A. 材料科学連続セミナーの概要

材料研究における計算材料科学の重要性の高まりを受け、2021年度からオンラインによる計算材料科学連続セミナーを開催している。2024年度からはより幅広い材料分野を対象とし、第一線の研究者の知見や技術を共有して材料研究のボトムアップを目的とした、オンラインの「材料科学連続セミナー」を開催した。

B. セミナーの詳細

化学材料第1シリーズ「データ科学と材料科学」

第1回「データ駆動科学のための第一原理計算と機械学習の応用」

安藤 康伸 先生（東京科学大学 准教授）

2026年1月7日（水） 13:30～18:15

参加人数：85名〔内訳〕学内39, 学外43（大学17, 企業等24, 研究機関2）, 講師他3

第2回「データ科学とAIによる次世代センシング・材料探索」

田村 亮 先生（物質・材料研究機構 グループリーダー／東京大学 講師）

2026年1月21日（水） 13:30～18:15

参加人数：72名〔内訳〕学内38, 学外31（大学12, 企業等19）, 講師他3

(2) ZAIKEN CAFÉの実施 ※2024年度からの新たな取り組み

A. ZAIKEN CAFÉの概要

幅広い材料研究の各分野から若手研究者に最新の研究内容を話してもらい、参加者が材料分野の様々なトピックについて学ぶとともに、発表者にとっても異分野を含む研究者との質疑応答を通じて、研究のさらなる進展と深化を図ることを目的としたオンライントークを開催。

B. ZAIKEN CAFÉの詳細

第1回（2025年7月10日）

1. 加藤 聖也（東京海洋大学 海洋資源エネルギー学部門 環境化学工学研究室 修士課程）
「坑廃水処理における Calcite 生成に伴う Mn の取り込み機構の解明」
2. 渡辺 倭（静岡大学大学院総合科学技術研究科 工学専攻 修士課程）
「層間熱伝導材料応用に向けた垂直配向カーボンナノチューブの熱輸送特性」

第2回（2025年10月9日）

1. 山本 航平（静岡大学大学院総合科学技術研究科 工学専攻 修士課程）
「多層カーボンナノチューブの高温熱処理がその引張強さに及ぼす影響の検討」
2. 秋山 広夢（早稲田大学 先進理工学研究科 応用化学専攻 博士課程）
「金属-担体相互作用を活用した Pd/TiO₂ 触媒による選択的水素化」

第3回（2025年11月6日）

1. Minghui Pan（埼玉工業大学大学院 工学研究科 生命環境化学専攻 修士課程）
「地熱スケールの有効利用に向けた高機能性材料の合成研究」
2. 高松 聖美（千葉工業大学 工学部 先端材料工学科 助教）
「セミソリッド発泡法で作製した発泡アルミニウム合金中の水素分析」

第4回（2025年12月11日）

1. Trakuldit Supicha（早稲田大学 基幹理工学研究科 材料科学専攻 博士課程）
「Coating of Molybdate-loaded LDH by Electrophoretic Deposition for Enhanced Corrosion Resistance of Al alloy」
2. 武田 清宇（鹿児島大学大学院理工学研究科 修士課程）
「マグネタイト Fe₃O₄ の元素置換効果」
3. 芝地 俊祐（岡山大学大学院環境生命自然科学研究科 数理情報科学学位プログラム 修士課程）
「ポリパラフェニレンベンズオキサゾール繊維複合を用いた乾式カーボンナノチューブ紡績糸の高強度化」

第5回（2026年1月22日）

1. 門井 洗衛（早稲田大学 基幹理工学研究科 材料科学専攻 博士課程）
「宇宙の炉」で解明するヘテロ凝固核の添加効果」

2. 熊木 拓海（早稲田大学 創造理工学研究科 総合機械工学専攻 博士課程）
「車体用 Al-8.5Si-0.4Fe-0.4Mn の機械的特性と時効挙動に及ぼす Cu, Mg 濃度の影響」

第 6 回（2026 年 2 月 12 日）

1. 鯉川 智生（早稲田大学 基幹理工学研究科 材料科学専攻 博士課程）
「酸化物アップコンバージョン蛍光体の発光特性」
2. 増田 拓海（早稲田大学 先進理工学研究科 応用化学専攻 博士課程）
「合金組成制御を指向した新規かご型シロキサン担体の合成」

参加延べ人数：99 名（学内 73 名・学外 26 名）

(3) 共同研究・共同利用のさらなる推進

A. 公募に基づく共同研究（長期）と共同利用（短期）の運営

○共同研究（長期）

2025 年 1 月 17 日（金）に拠点運営委員会、2025 年 1 月 28 日（火）に拠点実行委員会を開催し、2025 年度も昨年度と同様に年間 15 ～ 20 件程度の採択を目標に公募を行うこととした。

2025 年 2 月 5 日（水）に、ホームページを通じて公募を開始し、2025 年 3 月 5 日（水）に締切、17 件の応募があった。拠点実行委員会にて審査・協議の結果、以下 17 件を採択した。2025 年 4 月 4 日（金）に採択通知をメールにて送付。

（研究期間は 2025 年 4 月 4 日（金）～ 2026 年 3 月 31 日（火））

採択一覧

課題 番号	研究課題名 所属・職名・研究代表者名	重点 課題
02501	「海洋性微生物反応を介した硫化鉱物の生成・分離プロセスの検討」 東京海洋大学 海洋資源エネルギー学部門 准教授 淵田 茂司	Ⅱ - A
02502	「Engineering Cation Disorder in Novel Compound Semiconductors」 University of Hawai'i at Mānoa Associate Dean Steven M. Durbin	Ⅲ - A Ⅲ - B Ⅲ - C
02503	「ポリオキシメタレート の物性予測システム構築を基盤とした高効率物質変換反応の開発」 高知大学 教育研究部総合科学系複合領域科学部門 教授 上田 忠治	Ⅲ - A Ⅲ - B Ⅲ - C
02504	「Use of organo-nanosheets in water remediation」 University of Orléans Associate Professor GUEGAN Régis	Ⅰ - C Ⅱ - A Ⅱ - B Ⅱ - C
02505	「資源制約フリーなナトリウムイオン電池の開発」 理化学研究所 開拓研究本部 小林固体化学研究室 主任研究員 小林 玄器	Ⅰ - B
02506	「ナノカーボン複合化による超高強度カーボンナノチューブ紡績糸の創製と強度発現メカニズムの解明」 岡山大学 学術研究院環境生命自然科学学域 教授 林 靖彦	Ⅱ - A Ⅱ - B Ⅱ - C Ⅲ - B
02507	「Experimental and first-principles studies of the electronic properties of dopants in optical materials」 Centre of Excellence for Photoconversion, Vinča Institute of Nuclear Sciences - National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Belgrade, Serbia Professor Mihail G. Brik	Ⅲ - B Ⅲ - C
02508	「多層カーボンナノチューブの引張強度におよぼす欠陥量の影響の電子顕微鏡内引張試験による評価」 静岡大学 工学領域機械工学系列 教授 島村 佳伸	Ⅲ - B Ⅲ - C
02509	「トポロジカルジントル相の熱電特性」 東邦大学 理学部 講師 鈴木 健士	Ⅲ - C
02510	「カーボンナノチューブ成長触媒の超長寿命化に向けた触媒挙動解析」 静岡大学 工学領域電子物質科学系列 教授 井上 翼	Ⅲ - A Ⅲ - B

課題 番号	研究課題名 所属・職名・研究代表者名	重点 課題
02511	「Causal Inference for Investigating Property-Structure Relationships in High-Entropy Alloys and Energy-Efficient Materials」 University of Engineering and Technology, Vietnam National University, Hanoi Associate Professor Nguyen Hai Chau	I - B I - C III - B III - C
02512	「Fabrication of composite materials based on semiconducting oxides and precious metal for multifunctional applications」 Vietnam National University, University of Engineering and Technology Professor Hoang Nam Nhat	III - B III - C
02513	「Micro-thermometer composed of DNA liquid crystals」 Dipartimento di Scienze Farmacologiche e Biomolecolari, Università degli Studi di Milano Tenure Track Professor Tommaso P. Fraccia	I - C II - C
02514	「軌道分子相関を有する強相関電子系物質の基礎物性」 鹿児島大学 理工学研究科 准教授 奥田 哲治	III - C
02515	「地熱スケールを原材料とした高機能性材料の合成と物性評価」 埼玉工業大学 工学部生命環境化学科 教授 本郷 照久	I - A II - A
02516	「Development of stable inorganic lead-free halide perovskites for the solar cells」 Physical Technical Institute, National Academy of Sciences of Tajikistan Dr./ Head of Department Farhod Shokir	II - A II - B II - C
02517	「セミソリッド発泡法で作製する発泡アルミニウム合金の微粒子と初晶粒子の影響を受けた気孔安定化メカニズムの解明」 千葉工業大学 工学部 先端材料工学科 助教 高松 聖美	III - A

以上17件（海外共同研究7件）。

研究成果は以下のページにて公開予定。

<https://www.waseda.jp/fsci/zaiken/joint/list>

○共同利用（短期）

昨年度に引き続き、2025年4月1日（火）～2026年3月31日（火）の期間、ホームページを通じて共同利用を随時募集した。年間を通じて15件の応募があり、事前にフィージビリティを確認、実行委員会（随時開催のメール審議）にて審査の結果、以下15件を採択した。

採択一覧

No.	研究テーマ・所属・職名・研究代表者名・利用設備
1	「自社製カーボンナノチューブ（CNT）の品質向上に向けたスパッタ及びレシビの検討」 株式会社カーボンフライ 研究開発本部 研究員 森 彩乃 表面粗さ計、透過電子顕微鏡（200keV）、エネルギー分散形蛍光X線分析装置、複合ビーム加工観察装置、電界放出形走査透過電子顕微鏡、電界放出形走査電子顕微鏡、全自動水平型多目的X線回折装置
2	「鉄を含む強相関化合物のメスbauer分光」 帝京大学 理工学部 リベラルアーツセンター 教授 中村 真一 メスbauer分光装置
3	「Ni系触媒を用いたバイオオイルの水蒸気改質」 東京農工大学 大学院工学研究院 応用化学部門 助教 神谷 憲児 電界放出形走査透過電子顕微鏡（200kV）
4	「鉄系超伝導体およびその部分置換系の超伝導性」 東京理科大学 創域理工学部 先端物理学科 教授 矢口 宏 電子プローブ微小部分分析装置（EPMA）
5	「多環芳香族留分からBTXを製造する多機能水素化処理触媒の検討」 東京農工大学 生物機能システム科学府 生物機能システム応用化学学科 教授 銭 衛華 電界放出形走査透過電子顕微鏡（200kV）

No.	研究テーマ・所属・職名・研究代表者名・利用設備
6	「グルコースから二酸化炭素の水素化合成触媒の検討」 東京農工大学 生物機能システム科学府 生物機能システム応用化学学科 教授 銭 衛華 電界放出形走査透過電子顕微鏡 (200kV)
7	「異種金属置換した酸化物ナノシートの構造解析と電荷蓄積挙動」 信州大学 アクア・リジェネレーション機構 助教(特定雇用) 村松 佳祐 集束イオンビーム加工装置, 電界放出形走査透過電子顕微鏡 (200kV)
8	「微生物機能がもたらす鉱山廃水やコンクリートへの影響に関する研究」 東京海洋大学 学術研究院 海洋環境科学部門 准教授 牧田 寛子 走査型電子顕微鏡, 蛍光X線分析装置
9	「グラファイトオキシドを構造規定材としたマイクロ波炭素熱還元による ZrC ナノシートの合成」 東京電機大学大学院 物質工学専攻 無機合成化学研究室 教授 望月 大 FE-STEM (電界放出形走査透過電子顕微鏡), [追加申請] 透過電子顕微鏡 (120kV)
10	「Feを含む層状ペロブスカイト化合物の価数制御」 名古屋工業大学 大学院工学研究科 助教 漆原 大典 メスバウアー分光装置
11	「Ni系触媒を用いたバイオオイルの水素化脱酸素・異性化反応による航空燃料の製造」 東京農工大学 生物機能システム科学府 生物機能システム応用化学学科 教授 銭 衛華 電界放出形走査透過電子顕微鏡 (200kV)
12	「未利用物質を利活用する多孔質材料の創製」 日本大学理工学部物質応用化学科 無機材料化学研究室 教授 梅垣 哲士 SAXS (小角X線散乱測定装置)
13	「強相関遷移金属酸化物における元素置換効果」 東京理科大学 創域理工学部 先端物理学科 教授 矢口 宏 電子プローブ微小部分分析装置 (EPMA)
14	「Pt/TiC ナノシートにおける燃料電池性能評価」 東京電機大学大学院 物質工学専攻 無機合成化学研究室 教授 望月 大 透過電子顕微鏡 (120kV)
15	「前駆体 SiOx/rGO を用いたマイクロ波加熱による β -SiC ナノシートの合成と特性評価」 東京電機大学大学院 物質工学専攻 無機合成化学研究室 教授 望月 大 透過電子顕微鏡 (120kV)

以上15件。共同研究および共同利用による年間の学外利用延べ人数144名。

○共同利用・共同研究を活用して発表された論文数

2025年度	論文数	
		うち国際学術誌 掲載論文数
化 学	2 (1)	2 (1)
材 料 科 学	11 (2)	11 (2)
物 理 学	1 (0)	1 (0)
計 算 機 ・ 数 学	0 (0)	0 (0)
工 学	10 (0)	10 (0)
環 境 ・ 地 球 科 学	0 (0)	0 (0)
臨 床 医 学	0 (0)	0 (0)
基 礎 生 命 科 学	0 (0)	0 (0)
人 文 社 会 系	0 (0)	0 (0)
合 計	24 (3)	24 (3)

※ () 内の数字は、拠点に所属する研究者が、特に重要な役割・高い貢献（ファーストオーサー、コレスポンディングオーサー、ラストオーサー等）を果たしている論文数（内数）

B. 共同研究（長期）と共同利用（短期）実施のための研究支援体制の構築

○技術職員による専門的なサポート

技術職員は、各自の専門分野や担当装置を活かし、装置の維持管理だけでなく、利用者の計測機器の選定や、機器利用の目的を踏まえた測定計画の相談、試料前処理、データ取得後の解析支援まで一貫して対応している。特に共同研究・共同利用においては、研究者と密に連携し、遠隔地にいる研究者に対しても要望に応じてリモートでの技術相談、測定・分析等まで応じるなど、円滑かつ柔軟な研究遂行を支えている。これにより、装置の安定稼働と利用効率の向上を両立させている。

○海外共同研究者に対するサポート

採択した共同研究課題全17件のうち7件が海外との共同研究であったが、昨今の国際情勢の影響等による航空券代の高騰を受け、招聘に係る旅費の補助額を最大50万円に設定して対応した。結果、6名の海外研究者を招聘し、国際共同研究の発展につながった。

C. 共同利用・共同研究の環境整備（施設、設備等の整備、人的体制の整備等）

○施設、設備等の整備

＜設備等の整備（新規設置および更新・メンテナンス）＞

- ・高エネルギー分解能型卓上X線回折装置を新規導入
- ・電界放射型透過電子顕微鏡の元素分析システムについて高感度アタッチメントに更新
- ・高周波誘導炉（50kg）の築炉

○人的体制の整備等

拠点運営業務は、主担当職員1名を中心に、経理・庶務を担う事務スタッフと連携して遂行した。これにより、共同研究・共同利用の公募や審査・採択対応、旅費処理、各種刊行物による成果発信、各種イベント運営、予算の管理と執行、委員会事務局対応、広報・情報発信等を円滑に実施した。技術面では、技術職員8名が、走査電子顕微鏡（SEM）、透過電子顕微鏡（TEM）、表面分析装置（EPMA, AES, XPS）、試料加工観察装置（FIB-SEM）などの分析機器に加え、材料試験機（万能試験機、硬さ計、表面粗さ計）、工作機械（マシニングセンタ、旋盤、フライス盤、研削盤）、鑄造設備（高周波誘導炉）などの担当分野を明確にし、定期的な保守点検や装置間の情報共有を行いながら技術支援にあたっている。特に、電子顕微鏡、表面分析装置、大型加工機器など高度な操作を要する装置については、担当技術職員が専門知識と経験を活かし、継続的な技術指導を提供している。また、装置横断的な技術課題にも柔軟に対応できるよう、複数装置に対応可能な職員配置を進めており、突発的なニーズや装置トラブルにも迅速に対応できる体制を整えている。安定的な人員配置により、事務・技術の両面から拠点運営を支えている。

(4) 成果報告・学術交流・アウトリーチ活動

A. ワークショップ・セミナー等

（主催）第12回 ZAIKEN Festa（若手研究者によるポスターセッション）

幅広い材料分野の若手研究者が相互理解を深め、異分野交流の促進、研究情報発信の推進を図るための事業として開催。

日時：10月23日（木） 13：30～18：00 対面開催

参加人数：74名

発表者：39名（材研各研究室より33名、学外共同研究機関より6名：東京海洋大学3名（2研究室）、静岡大学2名、鹿児島大学1名）

ポスター審査員：18名、聴講者：17名

最優秀賞1名（東京海洋大学）、優秀賞2名、奨励賞8名

（主催）材研オープンセミナー

社会貢献の一環として、毎年1回、材料技術に関わるホットなテーマを取り上げ、第一線の講師によるセミナーを広く学内外の人を対象に開催している。当研究所が主催し、多くの学会の協賛を得ている。

テーマ：「構造不規則系の材料科学 基礎と新展開」

日時：11月21日（金） 13：00～16：55 対面とオンラインによるハイブリッド開催

演題・講演者：

1. 「液体論の基礎」 川北 至信（国立研究開発法人 日本原子力研究開発機構）
2. 「中性子利用による液体の実験」 坂口 佳史（一般財団法人 総合科学研究機構）
3. 「液体・ガラスのシミュレーション基礎」 田中 肇（東京大学 先端科学技術研究センター）
4. 「アモルファス・準結晶基礎」 平田 秋彦（早稲田大学理工学術院）

参加人数：114名（対面：59名，オンライン：55名）

（主催）共同研究成果報告会

令和7年度の共同利用・共同研究採択者を対象にオンラインによる報告会を開催し、それぞれ15分の発表・質疑応答を行った。

日時：3月3日（火） 13:00～17:35 Zoom ミーティングによるオンライン開催

参加者数：35名（発表者：17名（うち海外7名）、聴講者：18名（座長・事務局含む））

発表テーマ及び発表者

1. 「Cation Disorder in AgGaTe_2 」
Steven M. Durbin（University of Hawai'i at Manoa）
2. 「ポリオキシメタレートの物性予測システム構築を基盤とした高効率物質変換反応の開発」
上田 忠治（高知大学 教育研究部総合科学系 複合領域科学部門）
3. 「地熱スケールを原材料とした高機能性材料の合成と物性評価」
本郷 照久（埼玉工業大学 工学部 生命環境化学科）
4. 「坑廃水中のマンガン除去における炭酸塩生成メカニズム」
加藤 聖也（東京海洋大学 海洋資源エネルギー学部）
5. 「フッ化物表面修飾を施した層状岩塩型 $\text{Na}(\text{Fe}, \text{Ni}, \text{Mn})\text{O}_2$ の電極特性」
小林 玄器（理化学研究所 開拓研究本部）
6. 「多量体物質の基礎物性と熱電特性」
奥田 哲治（鹿児島大学 理工学研究科）
7. 「 LaCrSb_3 型 RVSb_3 ($\text{R} = \text{Pr}, \text{Nd}$) の輸送特性」
鈴木 健士（東邦大学 理学部）
8. 「セミソリッド発泡法で作製した発泡アルミニウム合金中の水素を含む微粒子の分析」
高松 聖美（千葉工業大学 工学部 先端材料工学科）
9. 「カーボンナノチューブの熱伝導特性解析と層間熱伝導材料開発」
井上 翼（静岡大学 工学領域電子物質科学系列）
10. 「多層カーボンナノチューブの引張強度におよぼす欠陥量の影響の電子顕微鏡内引張試験による評価」
山本 航平（静岡大学 工学領域機械工学系列）
11. 「流動場制御による湿式紡績カーボンナノチューブ紡績糸の高配向化/Flow-Field-Controlled Wet Spinning for Highly Aligned Carbon Nanotube Yarns」
岩谷 蓮（岡山大学 学術研究院環境生命自然科学学域）
12. 「Quantifying the Consistency of Strength-Hardness-Ductility Trade-offs in High-Entropy Alloys: A Causal Inference Approach」
Nguyen Hai Chau（Vietnam National University, University of Engineering and Technology）
13. 「Fabrication of soft magnetic materials for magnetic sensors」
Hoang Nam Nhat（Vietnam National University, University of Engineering and Technology）
14. 「Predicting and designing perovskite materials for solar cells using machine learning」
Farhod Shokir（National Academy of Sciences of Tajikistan）
15. 「 Ti^{3+} ions in crystalline solids: electronic and optical properties」
Mikhail G. Brik（University of Belgrade）
16. 「Liquid – liquid crystal phase separation in DNA – polycations mixtures」
Tommaso P. Fraccia（University of Milano）
17. 「Use of organo-nanosheets in water remediation」
Régis GUEGAN（University of Orléans）

B. 報告書・配布物等

・ ZAIKEN TODAY No.26 (発行 5 月)*

研究紹介「電波発電を目指したレクテナ用昇圧素子の開発」 柳谷 隆彦 研究員

インタビュー「電気系と化学系, サイエンスとエンジニアリングの双方向から新しい時代の, 新しい電池の
アイデアと材料を創出する」 大久保 将史 研究員

2024年度 研究業績 (学会等受賞実績)

・ 材研報告 No.81 (発行 7 月)*

研究題目一覧 (共同研究, 各個研究, 学外研究費による研究)

各研究室の研究成果紹介 (材研研究奨励生含む)

業績リスト (受賞, 著書・論文, 講演・発表)

プロジェクト研究 (共同研究)

共同利用・共同研究拠点 (事業報告, 成果報告)

事業報告 (各共同利用設備の利用状況報告, 各種講演会・セミナーの開催報告他)

・ ZAIKEN TODAY No.27 (発行12月)*

研究紹介「宇宙で金属の結晶を生み, 育てる——宇宙環境で探る金属 3D プリンター用材料の凝固・結晶微
細化メカニズム」 鈴木 進補 研究員

インタビュー「「やってみないとわからない」を追求してナノ材料の社会実装に立ちはだかる壁を突き破る」
荒尾 与史彦 研究員

2025年度 第12回 ZAIKEN Festa 受賞者紹介

※ ZAIKEN TODAY と材研報告は電子ファイル (PDF) をホームページに掲載

C. ホームページ・SNS 等による情報発信

4 月～ 材研ホームページにて共同利用・共同研究の公募, 研究活動, 各種行事等のお知らせ・報告, 研究設
備に関する情報発信を継続。

<https://www.waseda.jp/fsci/zaiken/>

4 月～ Facebook・X を活用し, 共同利用・共同研究の公募, 研究活動, 各種行事等のお知らせ・報告, 研究
設備に関する情報発信を継続。

Facebook <https://www.facebook.com/waseda.zaiken/>

X (旧 Twitter) https://x.com/waseda_ZAIKEN

4 月～ YouTube にて設備・施設の利用方法や研究所が所有する装置とその装置を使用した研究例を紹介する
動画などを配信。(研究所の装置と装置を使用した研究例の紹介動画)

https://www.youtube.com/@waseda_ZAIKEN

以上

課題番号 02501

東京海洋大学 海洋資源エネルギー学部門 准教授

淵田 茂司

海洋性微生物反応を介した硫化鉱物の生成・分離プロセスの検討

研究目的

硫化鉱物は非鉄金属資源として重要であり、長年その反応プロセスは無機化学的な主であった。しかし、鉄酸化細菌や硫酸還元菌が硫化鉱物の酸化及び溶解プロセスに寄与することが明らかとなり、鉱物分離技術や廃水処理技術で利用されている。本研究室では海洋微生物を用いた鉱物分離技術や廃水処理技術の開発、海底熱水鉱床成因に関する研究を行っている。微生物－硫化鉱物間で生じる物理化学反応機構を明らかにし、金属資源開発の4Rに資するバイオハイドロメタラジー技術の開発を目指す。

実験内容と研究成果

ZnSのガルバニック反応における好塩性硫黄酸化細菌の影響評価

海底熱水系を模したpH 4.0の海水に、閃亜鉛鉱 (ZnS) および黄鉄鉱 (FeS₂) を加え、好塩性硫黄酸化細菌である *Acidithiobacillus thiooxidans* が存在する条件と存在しない条件で15日間反応させZnの溶出量を比較した。ZnSのみの場合、*Acidithiobacillus thiooxidans* が存在しない条件ではpHが6まで上昇した一方、*Acidithiobacillus thiooxidans* が存在する条件ではpHが3.5に低下した。15日間反応させた後のZn濃度は*Acidithiobacillus thiooxidans* が存在しない条件で12 mg/Lであったが、*Acidithiobacillus thiooxidans* が存在する条件では18 mg/Lまで上昇した。pHおよびZn濃度の変化から *Acidithiobacillus thiooxidans* がZnSの酸化溶解を促進したと考えられる。一方、ZnSにFeS₂を共存させた場合、15日間反応させた後のZn濃度は*Acidithiobacillus thiooxidans* が存在しない条件で60 mg/Lとかなり大きくなったが、*Acidithiobacillus thiooxidans* が存在する条件では52 mg/Lとわずかに減少した。この結果から、ZnSの酸化溶解速度は黄鉄鉱の共存により著しく促進されるが、その効果は好塩性硫黄酸化細菌によってわずかに抑制されることが分かった。考えられる反応メカニズムとして、好塩性硫黄酸化細菌による硫黄酸化膜など不動態膜の生成である。そこで、実験後に回収した試料をX線光電子分光法 (XPS) で分析したが、好塩性硫黄酸化細菌の有無でZnやSのスペクトルに違いが見られなかった。

炭酸カルシウム生成におけるMn取り込みメカニズムの解明

Mn, HCO₃⁻, Caを含む模擬廃水を作成し、攪拌させながらpHを6～10に調整して最大180分まで反応させた回収した固体試料を用いてX線吸収端微細構造 (XAFS)

および電界放出形走査電子顕微鏡 (FE-SEM) で分析した。XAFS分析については、広域X線吸収微細構造 (EXAFS) 領域の解析を行い、動径構造関数 (R: 1.05–3.50) に対するカーブフィッティングから原子間距離、およびデバワイラ因子を決定した。沈殿物のEXAFS領域の解析の結果、溶液中のCa濃度が変化しても、沈殿物中のMnは第一配位圏のMnとOの原子間距離に変化は見られなかった。一方、第二配位圏のMnとCa間の原子間距離は溶液中のCa濃度の増加に伴って増加した。これは主に置換型固溶体に見られる現象であり、Mnは固溶体 (Ca_xMn_{1-x}CO₃) の生成により除去されることが明らかとなった。この粒子の断面をFE-STEMで分析したところ、中心付近でMn濃度が高く、外縁に向かってMn濃度が低くなるheterogenicは構造が確認された。このことから、Mn固溶体の生成は一般的な反応として生じるのではなく、溶解度積の小さいMnに富む炭酸塩が核として生成し、その後CaCO₃の生成が促進され固溶体が生成するメカニズムが考えられる。

研究成果の公表状況

(論文、国際・国内会議、学会発表、特許等の知財)

国際会議 (学会発表)

Fuchida S., Makita H., Kato S., Nakamura A., Ito H., Kawahara R., and Ohara Y., “Microbial iron removal process by aeration and schwertmannite formation from acid mine drainage at the Date mine, Japan”, Goldschmidt Conference, July 2025

Kato S., Ohara Y., Kawahara R., and Fuchida S., “Mn removal mechanism from neutral pH mine water coexisting bicarbonate and calcium ions in active treatment”, Goldschmidt Conference, July 2025

Kawasaki M., Tani K., and Fuchida S., “Investigation on arsenic dissolution behavior and its bearing minerals in seafloor massive sulfide ores”, Goldschmidt Conference, July 2025

国内会議 (学会発表)

淵田茂司, 加藤聖也, 佐々木直哉, “坑廃水の処理で発生する殿物の減容化に向けた最適な処理条件の検討”, 資源・素材学会 春季大会, 2026年3月

中村碧, 伊藤裕基, 加藤聖也, 小原義之, 川原里紗, 牧田寛子, 淵田茂司, “酸性坑廃水中のFe (II) 酸化処理速度における鉄酸化細菌の影響および生成する鉄スラッジのヒ素除去特性”, 第12回 ZAIKEN Festa, 2025年10月

佐々木直哉, 加藤聖也, 淵田茂司, “異なる中和剤を用いた坑廃水処理における殿物生成量と有害元素除去効率の違い

いおよび経済性評価”，第12回 ZAIKEN Festa，2025年10月
伊藤裕基，中村碧，加藤聖也，小原義之，川原里紗，淵田
茂司，牧田寛子，“伊達鉍山酸性坑廃水中の鉄酸化細菌が
廃水処理に与える影響”，第12回 ZAIKEN Festa，2025年10
月（最優秀賞受賞）

加藤聖也，淵田茂司，“地球化学モデルを用いた坑廃水中
のマンガン処理における炭酸塩生成メカニズムの速度論的
考察”，日本地球化学会 第72回年会，2025年9月（学生
優秀賞受賞）

中村碧，伊藤裕基，加藤聖也，小原義之，川原里紗，牧田
寛子，淵田茂司，“酸性坑廃水中のFe(II)酸化反応速度に
おける鉄酸化細菌の影響および生成する鉄スラッジのヒ素
除去特性”，日本地球化学会 第72回年会，2025年9月

淵田茂司，中村碧，伊藤裕基，加藤聖也，小原義之，川原
里紗，牧田寛子，“酸性坑廃水の曝気処理における鉄処理
効率に関係する化学条件の考察”，資源・素材学会 秋季
大会，2025年9月

淵田茂司，小山恵史，牧田寛子，“海洋性鉄酸化細菌を用
いた銅鉍石の海水浮遊選鉍法”，資源・素材学会 秋季大
会，2025年9月

加藤聖也，淵田茂司，“炭酸イオンを含む坑廃水の中和処
理におけるCalcite生成とMn除去効率の関係”，資源・素
材学会 秋季大会，2025年9月

伊藤裕基，中村碧，加藤聖也，小原義之，川原里紗，淵田
茂司，牧田寛子，“伊達鉍山酸性坑廃水中の鉄酸化細菌が
廃水処理に与える影響”，資源・素材学会秋季大会，2025

年9月

加藤聖也，淵田茂司，“高アルカリ度坑廃水の中和処理に
おけるCalcite生成のMn除去効率および生成沈殿物への影
響”，第22回「資源・素材・環境」技術と研究の交流会，
2025年8月

中村碧，伊藤裕基，加藤聖也，小原義之，川原里紗，牧田
寛子，淵田茂司，“伊達鉍山酸性坑廃水中の溶存鉄処理条
件の検討および生成するスラッジのヒ素除去特性”，第22
回「資源・素材・環境」技術と研究の交流会，2025年8月
佐々木直哉，加藤聖也，淵田茂司，“異なる中和剤を用い
た坑廃水処理における殿物生成量と有害元素除去効率の違
いおよび経済性評価”，第22回「資源・素材・環境」技術
と研究の交流会，2025年8月

伊藤裕基，中村碧，加藤聖也，小原義之，川原里紗，淵田
茂司，牧田寛子，“伊達鉍山酸性坑廃水中の鉄酸化細菌が
廃水処理に与える影響”，第22回「資源・素材・環境」技
術と研究の交流会，2025年8月

中村碧，伊藤裕基，加藤聖也，小原義之，川原里紗，牧田
寛子，淵田茂司，“伊達鉍山酸性坑廃水処理における水質
の季節変化の影響および溶存鉄の選択的除去方法の検討”，
環境資源工学会 第143回学術講演会，2025年6月（優秀
ポスター賞受賞）

伊藤裕基，中村碧，加藤聖也，小原義之，川原里紗，淵田
茂司，牧田寛子，“伊達鉍山酸性坑廃水中の鉄酸化細菌叢
の季節変化および鉄除去プロセスに与える影響”，環境資
源工学会 第143回学術講演会，2025年6月

Steven M. Durbin

Engineering Cation Disorder in Novel Compound Semiconductors

Aim of the research project

The aim of the research project is to determine the extent which controlled introduction of cation disorder in the candidate photovoltaic material AgGaTe_2 can be exploited to engineer specific properties relevant to electronic devices, including the band gap energy, in collaboration with the Kobayashi research group.

The project has its basis in the pioneering work of Bragg and Williams from the 1930s, who employed x-ray diffraction to quantitatively measure the amount of disorder present in metal alloys [1]. Subsequently, Loveluck and Sokolov [2] demonstrated a Raman spectroscopy-based alternative to determining what is now referred to as the Bragg-Williams order parameter (S), and two of this team (S. Durbin and R. Makin, Western Michigan University) developed a method based on analysis of electron microscopy images [3]. The same framework can be made to apply to crystalline semiconductors, and an Ising model approach coupled with cluster expansion theory allows for a direct relationship to be established between S^2 and specific properties, such as the band gap energy.

Typically, the value of S^2 is determined during synthesis, through adjustment of specific process parameters. In the case of AgGaTe_2 synthesized using the two-step radio-frequency magnetron sputtering process employed for this study, suitable energetics should be available, although we are also interested in the potential adjustment available through ex-situ ion bombardment.

Contents and results of the research

We have measured the Bragg-Williams parameter for the first series of AgGaTe_2 samples synthesized at Waseda University employing our methodology based on analysis of scanning electron microscopy images (Fig. 1a). However, concerns regarding the incomplete substrate layer coverage for some samples is an indication that an additional analysis step is likely needed, where a heat map is generated to ascertain the range of S^2 values across the sample. We also plan to measure the stoichiometry of the samples, as preliminary comparison with samples reported in the literature (Fig. 1b) – which show good linear behavior of S^2 with temperature, consistent with a viable measure of a continuous order-disorder transition – suggest a

sufficiently different composition to impact the band gap energy.

Detailed analysis indicates that it is straightforward to achieve the ideal single junction band gap energy of 1.3 – 1.5 eV in this material by tuning cation disorder to a moderate value (approximately 0.02 to 0.35 for nominally stoichiometry material, with the same value achievable with either Ag or Ga excess at different values of S^2). We would like to extend the study to include a new series of AgGaTe_2 where process parameters are adjusted, with the goal of employing transfer learning within an artificial intelligence model to assist with mapping the achievable values of S^2 (and through that, achievable values of band gap energy).

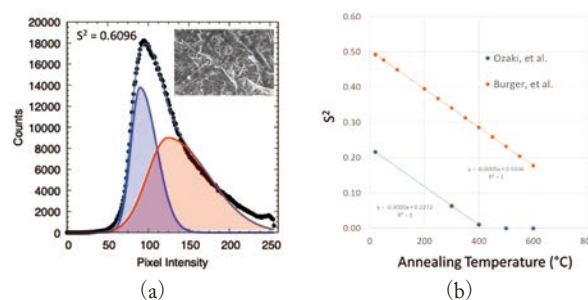


Figure 1 (a) Example histogram analysis of a scanning electron microscopy (SEM) image of a magnetron-sputtering deposited AgGaTe_2 sample, with a measured value of $S^2 = 0.6096$. (b) Plot of S^2 as function of sample annealing temperature from two AgGaTe_2 studies in the literature (refs. [4,5]).

Outputs of the project (publications, presentations, patents)

A paper is currently in development, pending ion beam analysis (Rutherford Backscattering Spectrometry) followed by ion beam bombardment, which has been difficult to schedule (experiments anticipated by May 2026). The results of the study have been presented annually at the ZAIKEN program reporting sessions (online).

- [1] W. L. Bragg and E. J. Williams, Proc. Royal Soc. London. Series A. 145 (1934) 699-730.
- [2] J. M. Loveluck and J. Sokoloff, J. Phys. Chem. Solids 34 (1973) 869-884.
- [3] R. A. Makin, et al., Phys. Rev. Lett. 122 (2019) 256403.
- [4] S. Ozaki and T. Ogura, Jpn. J. Appl. Phys. 53 (2014) 44-49.
- [5] A. Burger, et al., J. Crystal Growth 225 (2001) 505-511.

上田 忠治

ポリオキソメタレートの物性予測システム構築を基盤とした高効率物質変換反応の開発

研究目的

ポリオキソメタレート (POM) の組成および構造を制御した高機能性環境触媒材料を合成するとともに、その化学的性質を計算化学による理論的な解析と実験的なデータとの比較によって、POMの物性予測可能なシステムを構築する。これによって、目的の反応に対して適切な触媒を理論的に選択することが可能となることから、本研究は省エネルギーに資する研究を展開する。

高い酸性度および高い酸化力を示すPOMを利用した触媒反応開発は、活発に行われているが、使用されているPOMの種類は非常に限定されている。本共同研究によって創出されるPOMの物性予測システムを使えば、目的の化学反応に最適なPOMを選択出来るようになるとともに、その触媒反応効率も飛躍的に向上することが予想される。つまり、高い酸性度と高い酸化力を有する触媒が必要不可欠な物質変換反応が含まれるバイオマス、創薬化学、石油化学等の分野の研究との融合が推進できる。

実験内容と研究成果

実験内容

(A) 新規M-S-POMの電気化学的酸化還元測定および定量的解析

当研究室で合成法を開発した新規POM ($[S_2MW_{17}O_{61}]^n$, $[SMW_{11}O_{40}]^n$) を中心に、有機溶媒およびイオン性液体などにおける電気化学的酸化還元挙動を、サイクリックボルタンメトリー (CV) やフーリエ変換交流ボルタンメトリー (FT-ACV) によって詳細に調べ、電子移動速度等の電気化学パラメータを算出する。

(B) POMの量子化学計算による電気化学的酸化還元反応機構の解析

POM自身の量子化学計算を行って、POMの電子状態を明らかにする。POMの組成および構造による酸化還元電位の差、各種イオンおよび分子との相互作用する部位の特定を行う。これらの量子化学計算は、実験から得られるデータを最大限利用して行う。

研究成果

支持電解質として0.1 M $n\text{-Bu}_4\text{NPF}_6$ を含む有機溶媒 (CH_3CN , DMSO , PC) に0.5 mM $[\text{SVW}_{11}\text{O}_{40}]^{3-}$ (SVW_{11}), $[\text{V}_{in}\text{V}_{out}\text{W}_{11}\text{O}_{40}]^{4-}$ ($\text{V}_{in}\text{V}_{out}\text{W}_{11}$) および $[\text{V}_{in}\text{W}_{12}\text{O}_{40}]^{3-}$ ($\text{V}_{in}\text{W}_{12}$) をそれぞれ溶かして、CVおよびFT-ACVによって電気化

学的酸化還元挙動を調べた。作用電極にグラッシーカーボン電極、対極にPt線、参照電極にはAg線あるいはPt線を用いて測定した。 $\text{SV}_{out}\text{W}_{11}$ の第1波は $\text{V}_{out}^{V/IV}$ 、第2波は $\text{W}^{VI/V}$ 、 $\text{V}_{in}\text{V}_{out}\text{W}_{11}$ の第1波は $\text{V}_{out}^{V/IV}$ 、第2波は $\text{V}_{in}^{V/IV}$ 、 $\text{V}_{in}\text{W}_{12}$ の第1波は $\text{V}_{in}^{V/IV}$ 、第2波は $\text{W}^{VI/V}$ の還元それぞれに対応している (Fig. 1)。FT-ACボルタモグラムのシミュレーションから、それぞれの電極反応速度を算出した (Fig. 1)。ただし、 DMSO 中における $\text{V}_{in}\text{V}_{out}\text{W}_{11}$ の2波目の還元に関しては、CVのシミュレーションから算出した。どの溶媒でも2波目の還元における電極速度定数が小さくなった。特に $\text{V}_{in}\text{V}_{out}\text{W}_{11}$ の2波目の還元に関しては、どの溶媒中においても極端に小さい値となった。これは、1波目で骨格部分のVが還元されている状態で、2波目の電子が中心部分のVに到達するためには、他のPOMよりも反発力を受けやすいからであると示唆される。

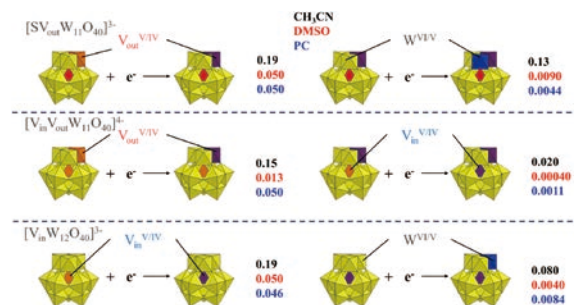


Fig. 1

様々なイオン液体中におけるフェロセンの電気化学的酸化還元において、フェロセンの酸化還元が外圏型電子移動と仮定した場合、その電子移動速度 (電極反応速度) の対数は、溶媒の粘度の対数と比例関係にあることが報告されている (*J. Phys. Chem. C*, 2016, 120, 16516-16525)。この関係を、本研究で得られた電極反応速度定数の対数と、有機溶媒の粘度の対数との関係を調べたところ、直線関係になることが分かった。つまり、調査した一連のPOMの酸化還元反応は外圏型電子移動反応であることが示された。以上のことから、当初予定していたPOMの電気化学的酸化還元反応における定量的な解析は実施することができた。来年度以降は、電気化学的酸化還元特性のPOMの組成依存性について、量子化学計算によって解析を進めていくと共に、これまで得られた研究結果をもとに、グリーンケミストリーに資する触媒反応開発およびPOMを含む高機能性複合材料開発を行う予定である。

研究成果の公表状況

(論文, 国際・国内会議, 学会発表, 特許等の知財)

国際会議

1. T. Ueda, S. Azuma, S. Ogo, Voltammetric Behavior of Keggin-type Vanadium-containing Poltoxometalates: Redox Sites and Redox Kinetics, 20th Asian Chemical Congress, Bangkok, Thailand (2025/6/23-27).

国内会議

1. 上田忠治, 東慎也, 小河脩平, G. Kennedy, J. Zhang, A. M. Bond, ポリオキソメタレート of 電気化学的酸化還元における電極反応速度に及ぼす溶媒効果, 日本分析化学会 第74年会, 北海道, (2025/9/24-26).

GUEGAN Régis

Use of organo-nanosheets in water remediation

Aim of the research project

The widespread contamination of aquatic environments and drinking water by persistent pollutants, including nanoplastics, pharmaceuticals, and per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS), represents a major environmental and public health challenge. Among these contaminants, nanoplastics are of particular concern because of their extremely small size, persistence, and ability to adsorb and transport toxic organic pollutants as well as pathogenic microorganisms throughout aquatic ecosystems and food chains. Their detection and removal remain highly challenging using conventional water treatment technologies.

In response to these critical issues, this project aims at developing innovative hybrid nanocomposite materials based on inorganic nanosheets, including graphene oxide and layered phyllosilicates, combined with tailored organic surfactants for the efficient adsorption and removal of nanoplastics of different sizes and chemical compositions from water. By combining a large specific surface area, diverse adsorption sites, ion-exchange properties, and tunable hydrophobic interactions of the different building blocks, these multicomponent materials are expected to exhibit enhanced adsorption performances toward persistent plastic nanoparticles.

The project will also provide a comprehensive physicochemical characterization of the synthesized nanocomposites before and after nanoplastic adsorption using advanced analytical techniques, including electron microscopies, X-ray diffraction, small-angle X-ray scattering, and vibrational (FTIR) and UV spectroscopies. Ultimately, this research aims to develop sustainable (4R) adsorption technologies for nanoplastic remediation, contributing to improved water purification processes, the protection of aquatic ecosystems, and the preservation of drinking water resources.

Contents and results of the research

1. Different organoclays were prepared by using different

cationic and nonionic surfactants (different nature and hydrophilic lipophilic balance)

2. The structural organization of the organoclays was investigated by complementary techniques: XRD, FTIR confirming the proper intercalation of the surfactants within the interlayer space of the layered materials
3. The resulting hybrid materials were then dispersed in aqueous media, and their zeta potentials were then characterized
4. The hydraulic conductivity of the different collected hybrid materials were also characterized and compared to the pristine layered materials
5. The SEM and TEM observations of the polystyrene (PS) beads of different sizes (20, 50, 80, 200 nm) which were corroborated to that determined by DLS
6. The Zeta potential of the PS beads were also determined and UV characterization of the dispersions of the nanoplastics was also achieved
7. Batch experiments of the adsorption PS nanobeads (20, 50 nm) at different concentrations onto pristine clay minerals and their organo-layered analogous were studied
8. Expected adsorption isotherms will be determined to precisely quantify the of PS beads to the layered materials
9. The different hybrid materials (pristine clay minerals and organoclays) after being in contact with the PS beads were characterized by a set of complementary techniques for a complete understanding of the affinity of the nanoplastics
10. Dynamic adsorption experiments of PS beads on the layered materials

In addition to the proposal, my stay at Zaiken allows me to discuss with the research group of Prof. Sugahara about different projects related to the Janus nanosheets and titania nanosheets.

Outputs of the project (publications, presentations, patents)

It is still too premature to expect any potential outputs of the project but we are working on it.

小林 玄器

資源制約フリーなナトリウムイオン電池の開発

研究目的

本研究ではナトリウムイオン電池 (SIB: sodium ion battery) の普及に向けた課題であるエネルギー密度とサイクル特性の改善を目指し、正極材料の高電位領域での構造安定性の向上とサイクル特性の向上に取り組んだ。これらの課題解決には、正極材料の電極特性向上が必要であり、特性向上に向けた研究が盛んに行われてきた⁽¹⁾。正極材料の筆頭候補には比較的高エネルギー密度のO3型層状岩塩型構造の NaMO_2 (M=3d遷移金属) が挙げられ、本研究では比較的に高容量かつ高サイクル特性を示すことが報告されているO3型 $\text{Na}_{0.96}\text{Ca}_{0.02}[\text{Fe}_{0.41}\text{Ni}_{0.28}\text{Mn}_{0.31}]\text{Si}_{0.001}\text{O}_2$ を選択した。しかし、この材料の普及には更なる特性向上が必要である。そこで、高電位領域における構造安定性を高めるために、リチウムイオン電池 (LIB: lithium ion battery) の正極材料に対して表面修飾を施すことで、結晶表面にコアシェル構造を形成し、高電位領域における相転移を抑制することで、サイクル特性が向上した報告に基づきフッ化物の表面修飾に着目した⁽²⁻³⁾。本研究における添加剤の選択は、フッ素が高電位耐性に効果的であること、多価カチオンが層状岩塩型構造の表面近傍に局在化しやすいという知見に基づき、 NaF と CaF_2 を選択した。そこで、Na系においてもLi系と同様にフッ化物の表面修飾処理によってサイクル特性が向上するのかを検証するとともに、表面修飾処理によってバルク内での相転移挙動に及ぼす影響についても検討した。以上に基づき、本研究ではフッ化物の表面修飾がサイクル特性に与える影響を明らかにすることで、今後のSIBの正極材料開発において高エネルギー密度化に向けた新たな材料設計の指針を示すことを目的に据えた。

実験内容と研究成果

本研究では、層状岩塩型酸化物正極材料の中で比較的に高容量かつ高サイクル特性を示すことが報告されている、O3型 $\text{Na}_{0.96}\text{Ca}_{0.02}[\text{Fe}_{0.41}\text{Ni}_{0.28}\text{Mn}_{0.31}]\text{Si}_{0.001}\text{O}_2$ に着目した。この材料をSIBの実用的な正極材料として普及させるには更なる高エネルギー密度化と高サイクル特性化が必要である。そこで、 LiCoO_2 へ LiF と MgF_2 によって高電位領域での相転移が抑制され、サイクル特性が向上した報告に基づき⁽²⁾、リチウムイオン電池 (LIB: lithium ion battery) よりも充放電反応中の構造変化がサイクル特性に大きな影響を与えるSIBにおいても、フッ化物の表面修飾を施すことで高電位領域での相転移を抑制し、サイクル特性を向上させることができるのかを検証した。

XRD測定から、フッ化物との表面修飾処理によって格子の a 、 b 軸方向への縮小と、 c 軸方向への膨張が認められた。この格子定数変化は、 NaMO_2 (M=3d遷移金属) からNaが脱離した時の傾向と一致しており、表面修飾処理の過程でNaの一部がCa、Oの一部がFに置換された、もしくは、Naがフッ化物と反応して表面修飾層に引き抜かれたなど、バルクの組成に何らかの変化が生じたことを示唆している。また、XPS測定によって表面修飾処理後の粒子表面の化学結合を調べた結果、 NaF と CaF_2 に加え、Fe、Mn、NiとFの結合を示唆するピークが検出された。この結果はFが NaMO_2 に固溶した酸フッ化物層が少なくとも粒子表面近傍に形成されていることを示している。フルセルで実施した低電流中放電測定において、カットオフ電圧が1.0-4.3 Vの条件下では、100サイクル後に容量維持率が未修飾試料で69%、2 wt% 修飾した試料で76%となり、有意な効果が現れた。また、測定温度が50 °Cの条件下でも、未修飾試料で100サイクル後に容量維持率が42%であったのに対し、2 wt% 表面修飾試料では49%となり、サイクル特性の向上が認められた。充放電レート0.05 C (12mA g^{-1}) で実施した初期2サイクルのオペランドXRD測定では、未修飾試料が既報通りO3-P3-OP2の相転移を示した一方で⁽⁴⁾、2 wt%の表面修飾を施した試料では4.3 Vの高電位領域においてもP3相が主相として残存し、OP2相への転移が抑制されていることが確認できた。このOP2相への転移が抑制される傾向は、より遅い充放電レート0.025 C (6mA g^{-1}) での測定でも同様に捉えることができた。さらに、100サイクル充放電反応を実施した後のセルを解体し、取り出した電極の結晶構造をXRD測定で調べた。カットオフ電圧を1.0-4.3 Vとした場合、未修飾試料ではXRDパターンがO3型に戻らずP3型に変化していたのに対し、2 wt% 表面修飾試料ではO3型構造が維持されていること

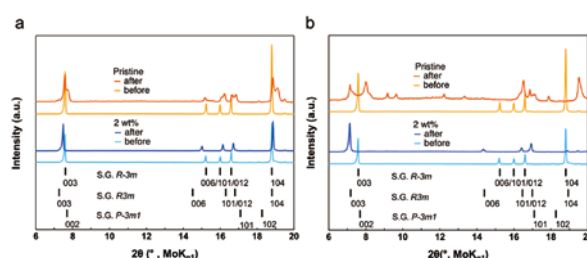


Fig. 1 Comparison of XRD patterns of pristine and 2 wt% sample before and after 100 cycles charge/discharge measurements (a) cut-off voltage: 1.0-4.3 V vs. Na/Na^+ (b) temperature: 50 °C. For comparison, XRD patterns has been normalized.

を確認できた。この結果は、表面修飾処理によって相転移の可逆性が改善したことを示している。この表面修飾の有無による相転移挙動の違いは、劣化が激しい50℃での充放電反応後により顕著に現れた。未修飾試料ではP3相とOP2相への相分離が進行した一方で、2 wt%表面修飾試料では、P3型構造が維持できている。以上の結果から、フッ化物表面修飾によってOP2型構造への転移が抑制されたことがサイクル特性の向上に支配的に寄与していたものと考えられる。

参考文献

1) N. Yabuuchi *et al.*, *Chem. Rev.*, **114**, 11636 (2014).

2) M. Mayumi *et al.*, *Commun. Mater.*, **5**, 108 (2024).

3) G. Kobayashi *et al.*, *J. Power Sources*, **303**, 250 (2016).

4) L. Julia *et al.*, *Chem. Mater.*, **32**, 7389 (2020).

研究成果の公表状況

(論文、国際・国内会議、学会発表、特許等の知財)

学会発表

小沼諒人，梶山智司，矢口寛，川本益揮，久保田圭，大久保將史，小林玄器，「O3型NaMO₂ (M=Fe, Ni, Mn) へのフッ化物表面修飾がサイクル特性に与える影響」，第66回電池討論会，名古屋市，2025年11月18日

林 靖彦

ナノカーボン複合化による超高強度カーボンナノチューブ紡績糸の創製と
強度発現メカニズムの解明

研究目的

高強度炭素を代替する、超軽量でフレキシブルなカーボンナノチューブ (CNT) 紡績糸の高強度化手法の開発と、そのメカニズムを解明する。本研究を通して、軽量・高強度化による輸送機器・インフラのエネルギー消費削減、長寿命化によるライフサイクルエネルギー削減、エネルギーデバイス分野での応用によるエネルギー効率向上、に貢献する。

異分野との融合

本研究は、CNTなどのナノ材料の合成やCNT紡績糸の作製に取り組む研究者と、破壊力学や微視構造制御の視点から先進複合材料の性能向上や応用分野の開拓を進める研究者が協力することで実現する、異分野融合型の研究である。

実験内容と研究成果

CNT紡績糸は、優れた引張強度を持つCNTを束ねた構体であるが、単一のCNTが持つ機械的特性を十分に発揮できていない。そのため、高強度化を実現するための手法の確立と高強度化のメカニズム解明が求められている。CNT紡績糸の強度が低下する主な原因として、CNT紡績糸を構成するCNTの物性にばらつきがあることや、欠陥の存在、さらに図1に示すようにCNT同士の分子間力が弱いために滑りが生じることが分かっている。これらの問題を解決するため、高品質なCNTの合成に加え、図2に示すようにCNT紡績に通電して発生するジュール加熱処理 (JA処理) やナノカーボン材料との複合化によるCNTおよびCNTバンドル間の架橋構造の導入など、さまざまなアプローチを検討してきた。その結果、3000 K以上のJA処理によって、紡績糸内に残留するCNT合成に寄与しなかったアモルファスカーボン (a-C) がグラフェンへと構造変化し、それに伴い引張強度が向上することが確認さ

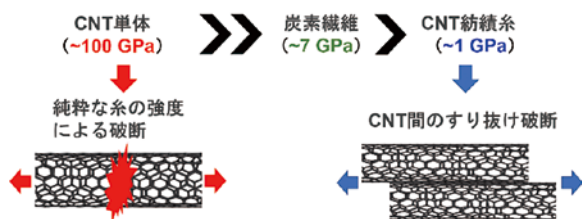


図1. CNT紡績糸の高強度化の課題

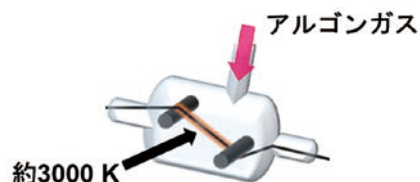


図2. ジュール加熱処理

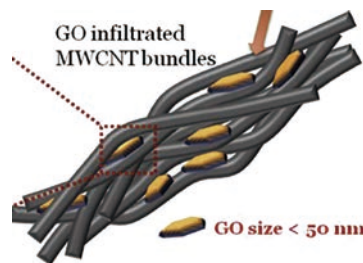


図3. GOと複合化したCNT紡績糸

れた。しかし、残留するa-Cの量を制御することが難しいという課題が残されている。

本研究では、炭素源として酸化グラフェン (GO) を意図的に導入・複合化し (図3)、3000 K以上のJA処理と組み合わせることで、再現性の高い高強度化手法を開発している。さらに、その高強度化メカニズムを解明するため、川田教授と共同で走査電子顕微鏡 (SEM) によるその場観察引張試験、透過型電子顕微鏡 (TEM) によるCNT紡績糸内部の微細構造評価、ラマン分光法による特性評価を併用して行う。GOを効率よく導入するために微細化処理を施し、微細化したGO溶液にCNT紡績糸を浸漬後、真空乾燥を行った。その後、張力をかけながらエタノール浸漬による収縮プロセスを行い (図2)、最終的にアルゴン雰囲気下の石英管内で紡績糸を3000 Kで通電加熱処理を行い、高強度CNT紡績糸を作製した。その後、SEMによるその場観察、TEM観察、ラマン分光評価を行った。

本研究では、カーボンナノチューブ (CNT) 紡績糸を酸化グラフェン (GO) 水溶液に浸漬し、条件を最適化することで、紡績糸内部へGOを導入・複合化した。さらに、CNT紡績糸に通電して3000 K以上のジュール加熱を行うJA処理を組み合わせることで、引張強度6.5 GPa以上、ヤング率300 GPa以上という高い機械特性を達成した。GOを導入することで、CNT紡績糸内部の空隙が減少し、より緻密な内部構造が形成され、再現性良く高強度化を実現できた。

研究成果の公表状況

(論文, 国際・国内会議, 学会発表, 特許等の知財)

- ・ 文タイトル : Unravelling the role of inter CNT yarn-yarn interactions in governing the failure behavior in a unidirectional CNT yarn-reinforced plastic composite
- ・ 著者 : Go Yamamoto, Sojun Nakano, Haruki Oyamada, Redha Akbar Ramadhan, Shugo Okamoto, Akihisa Takeuchi,

Masayuki Uesugi, Akira Kunitomo, Nozomu Shigemitsu, Takuma Abe, Yoshinobu Shimamura, Haruto Kurono, Sota Goto, Yoku Inoue, Yasuhiko Hayashi, Hiroyuki Kawada

- ・ 掲載雑誌名 : Composites Science and Technology
- ・ インパクトファクター : 8.3
- ・ 掲載年月 : 2025年 5 月
- ・ DOI : <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2025.111137>

Mihail G. Brik

Experimental and first-principles studies of the electronic properties of dopants in optical materials

Aim of the research project

Development of advanced optical materials is very important for many technological applications. The phosphor materials based on the transition metal or rare earth ions doped crystalline solids are used for lighting, sensing, bioimaging etc. Performance and limitations of such phosphors is determined by a combination of the properties of dopants and host materials. Thoroughly performed studies of their structural and electronic properties are of paramount importance for a meaningful development of phosphor materials. In this continued project with Prof. Yamamoto we extend our activities on the combined experimental and theoretical studies of the Mn^{4+} - and Cr^{3+} -doped phosphors and photon up-conversion in the rare-earth ions doped materials. These materials are vital for lighting, e.g. the Mn^{4+} -doped red phosphors improve properties of white LEDs, increase their efficiency and reduce their cost; in addition, they are also beneficial for plant growth. They can also be used for noncontact temperature measurements. We shall study the properties of the synthesized phosphor materials in the powder form (focusing on the perovskites and double perovskites), study their properties by the X-ray diffraction, UV-Vis, photoluminescence, ESR measurements and complement these experimental findings by the theoretical density functional theory (DFT)-based calculations to interpret the obtained results and elucidate the main factors affecting the materials' performance.

Contents and results of the research

1. Experimental and first-principles studies of Mn^{4+} -, Cr^{3+} - and rare-earth-ion-doped optical materials were continued through the collaboration between Prof. Tomoyuki Yamamoto's group at Waseda University and Prof. Mihail G. Brik's group at the University of Belgrade. Experimental characterization and density functional theory (DFT)-based calculations were carried out to clarify the relationships between crystal structures, electronic structures, and optical properties of phosphor materials.
2. First-principles DFT calculations were performed to investigate the electronic structures and optical transition energies of Cr^{3+} - and Mn^{4+} -activated phosphors. New computational schemes based on the ΔSCF -DFT approach were developed to evaluate the emission energies of Cr^{3+} -activated fluoride

phosphors, providing improved theoretical models for analyzing luminescence mechanisms.

3. The thermal quenching mechanism of Mn^{4+} -doped fluoride phosphors was systematically investigated by combining first-principles calculations with available experimental data. The study clarified the relationships among crystal structure, lattice stability, electronic structure, and luminescence efficiency, and proposed predictive design principles for high-performance phosphor materials suitable for energy-saving lighting applications.
4. Comparative theoretical studies on Cr^{3+} -activated oxide and fluoride phosphors revealed systematic relationships between local coordination environments, chemical bonding, and zero-phonon-line transition energies. These results provide useful guidelines for designing new near-infrared phosphors with improved optical performance.
5. Several joint papers were published in international journals during FY2025, and the research results were presented at international conferences held in Spain, Romania, and Latvia. These achievements further strengthened the long-term international collaboration between Waseda University and the University of Belgrade and expanded scientific exchanges with collaborating researchers in Europe, North America, and Asia.
6. Comparing the initial research plan with the obtained results, the expected objectives of the project were successfully achieved.

Outputs of the project (publications, presentations, patents)

The results of this joint research were disseminated through presentations at international conferences and publications in peer-reviewed international journals, as listed below.

The research results were presented at the following international conferences:

- 22nd International Conference on Radiation Effects on Insulators (REI-22), Madrid, Spain, June 8–13, 2025.
- 15th European Conference on Defects in Insulating Materials (EURODIM 2026), Timișoara, Romania, June 29–July 3, 2026.
- Functional Materials and Nanotechnologies (FMNT 2025), Riga, Latvia.

The following joint papers were published in peer-reviewed international journals:

- 1 . Zafari Umar, Oleg Khyzhun, Alexander Platonenko, Tomoyuki Yamamoto, Mikhail G. Brik, Michal Piasecki, Different calculating schemes for evaluating the transition emission energies in a Cr^{3+} -activated KMgF_3 phosphor: ΔSCF -DFT approaches, *Computational Condensed Matter* 47 (2026), e01274.
- 2 . Mekhrdod S. Kurboniyon, Alok M. Srivastava, William W. Beers, William E. Cohen, Mohammad Bagheri, Bibo Lou, Tomoyuki Yamamoto, Mikhail G. Brik, Chong-Geng Ma, First-principles study of thermal quenching mechanism of Mn^{4+} -doped fluoride phosphors: Electronic structure, optical properties and phosphor design principles, *Chemical Engineering Journal* 525 (2025), 170227.
- 3 . Zafari Umar, Oleg Khyzhun, Mekhrdod S. Kurboniyon, Tomoyuki Yamamoto, Mikhail G. Brik, Anatoli I. Popov, Michal Piasecki, Electronic structure and energy transitions in oxides and fluorides doped by octahedrally surrounded Cr^{3+} ions, *Optical Materials* 160 (2025), 116681.
- 4 . Mekhrdod S. Kurboniyon, Shamsulkhak Nurulkhakov, Bibo Lou, Khaiyom Rahmonov, Alok M. Srivastava, Mikhail G. Brik, Tomoyuki Yamamoto, Chong-Geng Ma, Influence of the First Cation A of $\text{A}_2\text{SiF}_6: \text{Mn}^{4+}$ (A = K, Rb, Cs) Phosphors on Their Geometric Structures and the Optical Transition Energies: First-Principles Analysis, *Journal of Electronic Materials* 54 (2025), 962-969.
- 5 . Mekhrdod S. Kurboniyon, Alok M. Srivastava, Bibo Lou, Yang Wang, Dan Zhang, Dzhumakhon M. Sharifov, Dulat H. Daurenbekov, Tomoyuki Yamamoto, Mikhail G. Brik, Chong-Geng Ma, Effect of Chemical Composition on the Optical Properties of Cr^{3+} Impurity in $\text{A}_3\text{B}_5\text{O}_{12}$ Garnets (A = Lu, Y, Gd, La; B = Al, Ga, Sc), *ACS Applied Optical Materials* 3 (2025), 422-430.

島村 佳伸

多層カーボンナノチューブの引張強度におよぼす
欠陥量の影響の電子顕微鏡内引張試験による評価

研究目的

本研究は軽量高強度な材料の創製による機械システムの省エネルギー化に寄与するため、多層カーボンナノチューブの強度発現を妨げる因子を実験的に明らかにすることを目的としている。

実験内容と研究成果

【実験内容】

○供試材

静岡大学井上翼教授提供の多層カーボンナノチューブを使用した。直径は10 nm, 30 nm, 40 nmの3水準であり、いずれも長さ数100 μm である。

○熱処理

熱処理無し、ならびに最高2,800 $^{\circ}\text{C}$ でのいくつかの温度で熱処理を実施した後、ラマン顕微鏡(XploRa-SPI, 堀場製作所)を用いて結晶化度(ラマンスペクトルのG-bandとD-bandの比 I_d/I_g で表すことができる)を分析した。その結果、 I_d/I_g でおよそ1.5~15の範囲の多層カーボンナノチューブ(MWNT)を用意できた。

○実験方法

各務記念材料技術研究所所有の走査型電子顕微鏡(SEM)(SU3500, 日立製作所)内で実施し、引張試験を試みた。具体的には、切断した透過型電子顕微鏡用のグリッドのエッジにMWNTを付着させることでMWNTを自立させた試料を事前に用意し(図1)、次に、SEMのチャンバー内にて、チャンバー内に設置されたピエゾ素子駆動

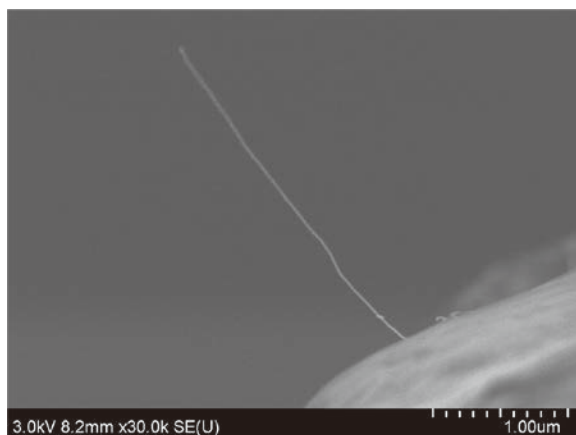


図1 自立したMWNT

のマニピュレータにとりつけた原子間力顕微鏡のカンチレバー(PPP-CPMTR-10, NANOSENSORS)の先端に自立したMWNTの端部を付着させ、顕微鏡画像を撮影しながら、カンチレバーを動かして、MWNTが破断するまで引っ張る。このとき、MWNT破断直前のカンチレバーの傾きから、MWNTに作用する最大引張荷重を推定可能であり、これをMWNTの断面積(本研究では中実と仮定)で除すことで引張強さが計算できる。

【研究成果】

○研究成果

本年度も3条件の直径のMWNTについてSEM中引張試験を試みたが、最も直径が細い直径10 nmのMWNTについては本年度も残念ながら引張強度を得ることができなかった。一方、直径30 nmについては追加で3本、40 nmのMWNTについては追加で2本の実験に成功した。

得られた引張強さをプロットしたものを昨年度のものも含めて図2に示す。縦軸はMWNT単体の引張強さ(断面積は中実と仮定して計算)、横軸は結晶化度を示す I_d/I_g 比である。

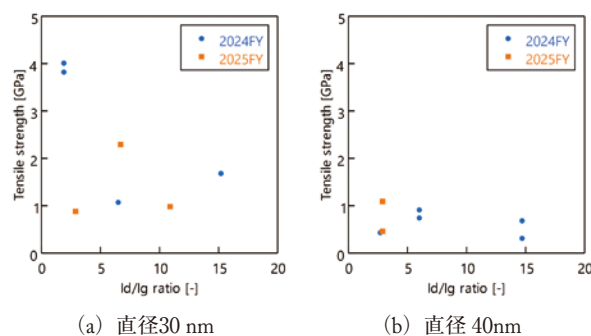


図2 MWNTの引張強度

それぞれの直径ごとに結晶化度の影響を確認すると、傾向としては結晶化度が大きくなるにつれて引張強度の低下が見られるが、結晶化度が近い条件の試験片に着目すると、引張強さは、その平均値にたいして1/2~2倍程度のばらつきがあることがわかる。引張強さの計算に必要な荷重の計測精度についても十分な議論が必要ではあるが、この結果が正しいとすると、引張強さはMWNT中の平均的な欠陥量では決まらず、脆性材料で一般的にみられるような、標点間に存在する最大欠陥に支配されていることが示唆される。

○応募時の申請で掲げた予想結果に対してどこまで達成できたか

直径30 nmと40 nmのデータ拡充については、合計で5本の結果が追加で得られたが、応募時に掲げたより細い直径10 nmのMWNTの引張試験の再チャレンジは今年度もうまくいかなかった。ついては、より実験の成功確率が高そうな直径20 nmのMWNTを用意する内容で継続申請を行い、引き続き本研究を実施させていただければと考えている。

研究成果の公表状況

(論文、国際・国内会議、学会発表、特許等の知財)

(国際シンポジウム 1 件)

Yoshinobu Shimamura, Jin Shirasaka, Tomoyuki Fujii, Hiroyuki Kawada, Atsushi Hosoi, Yoku Inoue, Evaluation of Tensile Strength of Multi-walled Carbon Nanotube by Ultrasonication and In-situ Tensile Test in SEM, Joint-Symposium on Mechanics of Advanced Materials & Structures 2025, 2025, Kyoto, Japan (Plenary)

(国内発表 1 件)

島村佳伸, 白坂仁, 藤井朋之, 川田宏之, 細井厚志, 井上翼, 超音波誘起切断法とSEM内引張試験による多層カーボンナノチューブの引張強度の評価, M&M2025 材料力学カンファレンス, pp.888-891, 2025, 熊本

鈴木 健士

トポロジカルジントル相の熱電特性

研究目的

熱電変換のエネルギー変換効率における電気的な因子（電力因子）を最も大きくする為には、キャリア濃度に対して相反する依存性を持つ熱起電力と電気伝導率を最適化する必要がある。その為、キャリア移動度の高い半導体が熱電変換材料候補として広く探索されてきた。その中で、カチオン-アニオン間の電荷移動とアニオン間結合の幾何学的な構造により閉殻構造を実現するジントル相は高い熱電効率を示す半導体材料として研究が進められている。一方、トポロジカル半導体はその電子構造から高い移動度持つ事が期待されている。本研究では、これらの概念を組み合わせた「トポロジカルジントル相」を対象として、その基礎物性を明らかにし、熱電変換材料としての可能性を探る事を目的とする。

実験内容と研究成果

LaCrSb_3 型希土類金属間化合物は、図1の様にSb正方副格子層、遷移金属-Sb八面体層、希土類層が結晶 c 軸方向に沿って積層する層状構造をとり、特にSb正方副格子の基本単位胞の大きさが結晶全体の ab 面内単位胞の大きさの半分となっている。この構造上の特徴により、本系は広い意味でのジントル相として分類する事ができ、更にSb正方格子上的 (p_x, p_y) 軌道が一般に高いキャリア移動度が期待できる線形分散の交差点をフェルミ準位近傍に持つトポロジカルな電子バンド構造を有する事が明らかとなって

いる。本研究では特に、遷移金属サイトが非磁性となる RVsb_3 ($R=\text{Pr, Nd, Gd}$) を対象とし、物質合成と輸送係数測定を通じて、熱電変換材料候補物質としての可能性を判断するに資する基礎伝導特性の解明を進めた。

RVsb_3 ($R=\text{Pr, Nd, Gd}$) 単結晶試料はSbをフラックス材として用いる金属フラックス法により育成し、長辺が最大5 mm程度に達する直方体状の試料を得る事に成功した。得られた試料は、粉末X線回折法及び磁化測定を通じて評価し、過去の報告[1]と同程度の格子定数及び磁性転移温度を示す単相試料である事を確認した。

また、 $R=\text{Pr}$ 及び Nd 試料について電気抵抗率及びホール抵抗率の測定を行った。零磁場下における電気抵抗率の温度依存性は、室温以下の測定全温度領域において金属的な振舞を示し、反強磁性転移温度において磁性-伝導性の結合に由来するキンク状の異常が観測された。また、電子清浄度の指標となる残留抵抗比 $\rho(T=300\text{ K})/\rho(T=2\text{ K})$ は $R=\text{Pr}$ (Nd) に対して4.5 (3.7) と得られた。これはSefatらの報告[1]と近い値であり、電子的にもこれまでの報告と同程度の質の結晶育成に成功している事が示唆される。更に磁場中における電気抵抗率・ホール抵抗率の測定を行った結果、反強磁性秩序相及び中間磁場相が強磁性秩序相に比べ高い電気抵抗率を示す異常が観測された一方で、ホール抵抗率は磁性転移に伴う急峻な変化は示さず、印加磁場に対して非線形な変化を示した(図2)。また、低磁場領域のホール抵抗率を線形フィットして見積もった高移

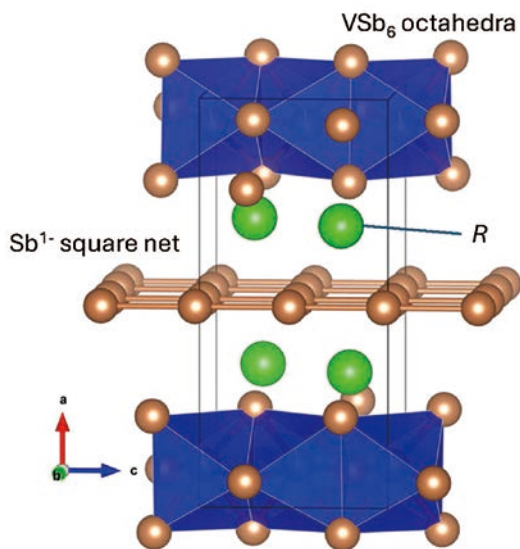


図1. LaCrSb_3 型 RVsb_3 (R = 希土類) の層状結晶構造

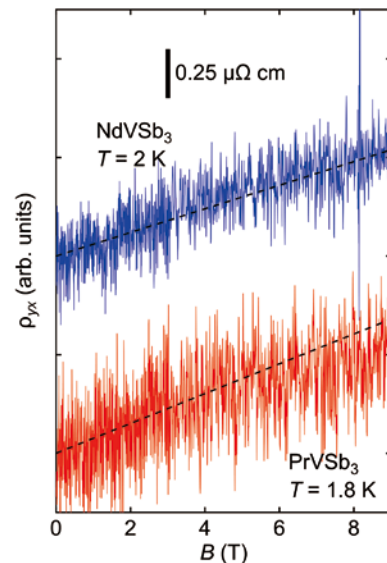


図2. NdVsb_3 及び PrVsb_3 におけるホール抵抗率。破線は低磁場領域の線形フィットを示す。

動度のキャリア濃度は 10^{22} cm^{-3} 程度であった。これらのことから、本物質系は、金属並みのキャリア数を持つ半金属であり、当初ジントル相として期待した熱電半導体の性質は示さなかったものの、各磁気秩序相で実現するミクロスコピックもしくはマクロスコピックなスピン配列に固有のキャリア散乱を持っており、磁気輸送特性の物理の観点からは興味深い事が明らかとなった。

[1] A. S. Sefat et al., J. Magn. Magn. Mater. 320, 120 (2008).

研究成果の公表状況

(論文、国際・国内会議、学会発表、特許等の知財)

[論文]

1. S. Kusakabe, R. Mikawa, H. Takei, T. Katsufuji, Y. Kawasaki, and T. Suzuki “Magnetotransport of a square-net topological semimetal with magnetization plateaus DyAgSb_2 ” *Phys. Rev. B* **112**, 205119 (2025).

[セミナー発表]

2. 鈴木健士 “Transport in magnetic multidomain states of nodal semimetals” HiSOR × WPI-SKCM2 ジョイントセミナー，2025年5月。

井上 翼

カーボンナノチューブの熱伝導特性解析と層間熱伝導材料開発

研究目的

カーボンナノチューブ (CNT) を半導体素子冷却用の熱伝導材料に応用すべく、超高密度CNT材料開発を目的として研究を実施する。CNT超高密度化では合成プロセスにおける触媒ナノ粒子熱挙動解明が重要である。CNT材料開発と熱特性解明は、近年電力需要が高まる半導体デバイスの省エネルギー化に資する重要な研究開発である。CNTの熱伝導特性を明らかにし、半導体冷却などで利用される層間熱伝導材料 (TIM) への適用性を調べる。

実験内容と研究成果

熱化学気相堆積法 (CVD) により、Si基板上に高密度に垂直配向CNTフォレストを形成した。加熱時の昇温速度を $100\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$ と高速化し、成長温度より低い $500\text{ }^{\circ}\text{C}$ 程度でCNT核形成を行うことで、非常に緻密なCNTフォレストを得た。このCNTフォレストの根元に酸化処理を施して基板から剥離し、熱抵抗測定用の試料とした。本研究では薄膜試料の厚み方向の熱抵抗を評価する手法として、過渡熱応答測定と構造関数解析を用いた。熱源と温度測定を兼ねるTEGチップと、冷却器であるコールドプレート (CP) の間にCNTを配置し、過渡冷却曲線の測定結果をもとに熱抵抗と熱容量からなる熱回路網モデルを構築して、CNT部の熱抵抗を算出した。図1に長さ $100\text{ }\mu\text{m}$ のCNTをTEG/CP間に挿入した際の構造関数を示す。CNTが無い場合の熱抵抗は $0.63\text{ cm}^2\text{K/W}$ であったのに対し、CNTを挿入することで $0.49\text{ cm}^2\text{K/W}$ に低下した。これにより、CNTがTIMとして熱抵抗を低減する効果を有することが確認された。

CNT長を $100\sim 700\text{ }\mu\text{m}$ の範囲で変化させた試料について、接触圧力を変化させて測定した熱抵抗を図2に示す。

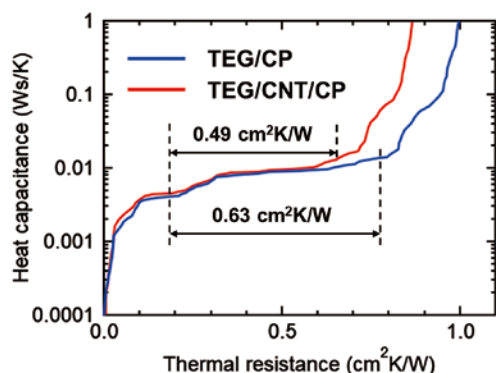


図1 CNTをTEG/CP間に挿入した際の構造関数比較

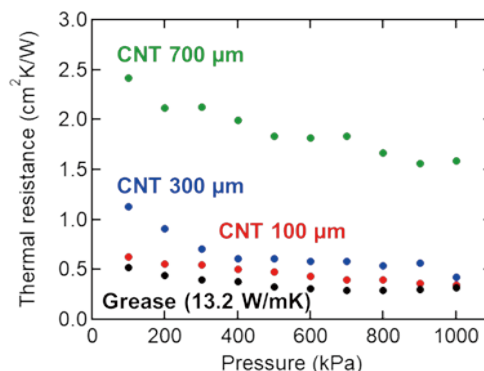


図2 長さの異なるCNTフォレストの熱抵抗の圧力依存性

CNT長 $700\text{ }\mu\text{m}$ では 100 kPa という低圧力時に $2.5\text{ cm}^2\text{K/W}$ とやや大きい値を示すのに対し、CNTが $300\text{ }\mu\text{m}$ 、 $100\text{ }\mu\text{m}$ と短くなるにつれて熱抵抗が減少する、明確なCNT長依存性が見られた。どの長さのCNTにおいても、接触圧力が大きくなるほど熱抵抗は単調減少する傾向が見られた。これは、高圧下でCNTがCPと良好に接触し、界面熱抵抗が減少したためと考えられる。ただし、 $300\text{ }\mu\text{m}$ および $100\text{ }\mu\text{m}$ のCNTでは、 400 kPa 以上の圧力領域では熱抵抗の減少がほぼ見られなくなった。この時の熱抵抗値(約 $0.5\text{ cm}^2\text{K/W}$)は、CNTバルクの熱抵抗よりも界面熱抵抗が支配的になっているためと推測される。なお、長さ $100\text{ }\mu\text{m}$ のCNTの熱抵抗は、全圧力領域において市販の熱伝導グリスとほぼ同等の大きさを示した。このことから、このような短いCNTは 100 kPa という低い接触圧力でも良好な接触状態が得られること、そして、測定された熱抵抗値の大部分が界面熱抵抗に支配されていることが示唆される。以上の結果から、高密度CNTフォレストは、 $100\text{ }\mu\text{m}$ 程度の長さであれば界面熱抵抗が支配的になるほど良好な熱輸送媒体として作用することが明らかになった。この界面熱抵抗は、CNTとCPのように格子振動周波数が大きくことなる界面において、フォノン散乱が顕著になることに起因している。CNTをTIMとしてさらに高性能化するには、このミスマッチの軽減が重要である。

CNTフォレストのハンドリング性を向上させるため、高耐熱樹脂であるポリフェニレンサルファイド (PPS) フィルムの両面にCNTを熱融着したフィルム状CNT-TIMを作製し、その熱輸送特性を評価した(図3)。比較のため、金属箔両面に直接CNTを合成した試料も作製し熱抵抗を評価したところ、中間材料によらず熱抵抗は $0.7\text{ cm}^2\text{K/W}$ 程度となった(図4)。界面での接触熱抵抗が支配

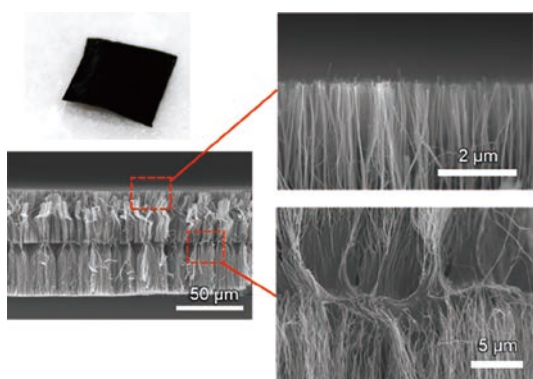


図3 CNT/PPS/CNT構造によるTIM

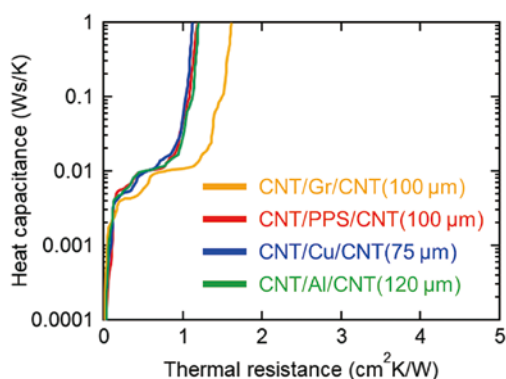


図4 サンドイッチ型CNT-TIMの構造関数

的である状況下においては、中間材料（樹脂層）自身の熱抵抗の寄与は相対的に小さい。そのため、樹脂であっても大きな熱障壁とはならず、CNT/PPS/CNT構造が良好なTIMとして機能することが示された。

研究成果の公表状況

（論文、国際・国内会議、学会発表、特許等の知財）

論文1 “Film-type carbon nanotube thermal interface materials for advanced thermal management: A study on interfacial resistance”, Tomoki Okumura, Takayuki Nakano, Yoku Inoue, Carbon **250**, 121288 (2026).

学会1 “高密度CNTフォレストによるTIM開発”，奥村友貴，中野貴之，井上翼，第35回マイクロエレクトロニクスシンポジウム（MES2025），2025/9/4，大阪大学 中之島センター

学会2 “Investigating heat transport properties of CNT forests by thermal structure function analysis”, Yamato Watanabe, Takayuki Nakano, Yoku Inoue, The 69th Fullerenes-Nanotubes-Graphene General Symposium（第69回FNTG学会），2025/9/24, National Taiwan Normal University（台湾・台北）

学会3 “垂直配向CNTフォレストの熱輸送特性”，渡辺倭，中野貴之，井上翼，第52回炭素材料学会年会，2025/11/26，長野市生涯学習センター

学会4 “CNT/Cu複合材料の電気・熱伝導メカニズム”，第52回炭素材料学会年会，奥村友貴，井上翼，中野貴之，2025/11/26，長野市生涯学習センター

Nguyen Hai Chau

Causal Inference for Investigating Property-Structure Relationships in High-Entropy Alloys and Energy-Efficient Materials

Aim of the research project

Machine learning (ML) is increasingly integrated with established methods in materials science, such as quantum chemistry and first-principles calculations, to accelerate and reduce the cost of material discovery. While ML excels at predicting material properties, it primarily captures correlations rather than causal relationships, limiting its ability to explain cause-and-effect mechanisms. Existing causal studies in materials science are often case-specific and lack generalizability.

This project aims to estimate the causal effects of varying atomic concentrations of multiple elements—such as in high-entropy alloys (HEAs) and optical materials—on their desired properties. By leveraging key variables like electronegativity, mixing enthalpy, and mixing entropy, we seek to answer: How much does a desired property change when a key variable shifts by one unit? Using causal inference (CI), our findings will provide deeper insights into materials development by uncovering fundamental causal relationships.

Contents and results of the research

High-entropy alloys (HEAs) are materials typically composed of five or more principal elements, each with an atomic concentration usually ranging between 5% and 35%. HEAs have gained significant research attention due to their superior mechanical and physical properties, such as yield strength and hardness, compared to conventional alloys [1, 2]. Researchers usually use Density Functional Theory (DFT), high-throughput (HT), Machine Learning (ML), or combination approaches to design them. While ML is good at predicting properties, it only based on correlations. It does not explain the actual cause and effect [3]. Most causal studies today are also limited to specific cases and are hard to apply generally [4, 5, 6, 7].

In 2025, we focused our project on the hardness of HEAs. We developed a new version of the HEACM model [8] called HEACM for hardness [9]. This model uses Double/Debiased Machine Learning (DoubleML) [10] to find the causal impacts of the key variables: valence electron concentration (VEC), mixing enthalpy (ΔH_{mix}), and mixing entropy (ΔS_{mix}) on the hardness of HEAs. Our new results show how these variables change the hardness of HEAs:

- A one-unit increase in valence electron concentration (VEC)

leads to a decrease in Vickers hardness by 184.29 units (robustness value = 31.7%).

- A one-unit increase in mixing enthalpy (ΔH_{mix}) leads to a decrease in Vickers hardness by 3.38 units (robustness value = 8.35%).
- A one-unit increase in mixing entropy (ΔS_{mix}) leads to an increase in Vickers hardness by 44.37 units (robustness value = 21.3%).

Future research direction: We now have two causal models: the HEACM model for yield strength [8] and the new model for hardness [9]. Our next step is to develop a causal framework for the trade-offs between hardness, strength, and ductility - a classic and critical problem in HEA research.

References

1. D. B. Miracle, O. N. Senkov, *Acta Mater.* 122, 2017, 448-511.
2. Y. F. Ye, et al., *Mater. Today* 19(6), 2016, 349-362.
3. S. Arif, M. A. MacNeil, Predictive models aren't for causal inference, *Ecology Letters* 25 (2022).
4. J. Kumar, A. Linda, M. Sadhasivam, K.G. Pradeep, N.P. Gurao, K. Biswas, The effect of Al addition on solid solution strengthening in CoCrFeMnNi: Experiment and modelling, *Acta Materialia* 238 (2022).
5. Y. Chen, W. Liu, H. Wang, J. Xie, T. Zhang, L. Yin, Y. Huang, Effect of Ti content on the microstructure and properties of CoCrFeNiMnTi_x high entropy alloy, *Entropy* 24 (2022).
6. Z. Feng, C. Zhang, C. Gu, M. Xu, L. Yang, L. Wang, J. Yi, Effect of Ti on microstructure and mechanical properties of CoFeNiVTi_x high-entropy alloys, *Journal of Materials Engineering and Performance* (2023).
7. S. Chen, L. Bao, H. Yang, X. Si, Q. Yu, Effect of Al content on microstructure and mechanical properties of Al_x(Nb₃TaTi₃Zr)_{100-x} refractory high-entropy alloys, *Journal of Physics: Conference Series* 2691, 12071 (2024).
8. N. H. Chau and T. Yamamoto, "Effects of changing atomic concentration of a single element on the yield strength of high-entropy alloys: A causal inference study," *Journal of Electronic Materials*, pp. 1-12, 2025. Topical collection: *Frontiers in Materials Science* 2024.

9. T. K. Ly, N. H. Chau, and T. Yamamoto, “A causal inference approach to assess the effects of atomic concentration changes on the hardness of high-entropy alloys,” in *Computational Collective Intelligence* (N. T. Nguyen, V. Dinh Duc Anh, A. Kozierekiewicz, S. Nguyen Van, M. Núñez, J. Treur, and G. Vossen, eds.), (Cham), pp. 152-166, Springer Nature Switzerland, 2026.
10. V. Chernozhukov, D. Chetverikov, M. Demirer, E. Duflo, C. Hansen, W. Newey, and J. Robins, Double/debiased machine learning for treatment and structural parameters. *Economet. J.* 21, 1 (2018).

Outputs of the project (publications, presentations, patents)

1. T. K. Ly, N. H. Chau, and T. Yamamoto, “A causal inference approach to assess the effects of atomic concentration changes on the hardness of high-entropy alloys,” in *Computational Collective Intelligence* (N. T. Nguyen, V. Dinh Duc Anh, A. Kozierekiewicz, S. Nguyen Van, M. Núñez, J. Treur, and G. Vossen, eds.), (Cham), pp. 152-166, Springer Nature Switzerland, 2026.

HOANG Nam Nhat

Fabrication of composite materials based on semiconducting oxides and precious metal for multifunctional applications

Aim of the research project

In this study, we aim to research, develop, and manufacture new composite materials with enhanced absorption capabilities in the visible light region, to facilitate efficient hydrogen production through water splitting and can be used as SERS sensors to detect toxic substances in the environment.

(1) Materials preparation:

- The new materials are prepared by rapid quenching method by a rapid quenching system installed in the Vietnam National University.

(2) Materials characterization:

- The characterizations are carried out at Waseda university, Tokyo, Japan, in particular, the structural and magnetic characterization by mean of X-ray diffraction and Superconducting Quantum Interference Device (SQUID) measurements.

The expected outcomes include (Automotive & Energy saving):

- Properties of materials under the studied factors will be applied to advanced management techniques of energy consumption and energy saving.

Contents and results of the research

According to the research plan specified in this research proposal, we have carried out the following materials preparation and characterization:

- (1) The ribbons of Co-based alloys were prepared by rapid quenching method (at VNU).
- (2) The structural characterization (X-ray diffraction measurements and the magnetic characterization (VSM and SQUID) (at Waseda Univ.).

The typical results are shown in two figures below. Fig. 1 shows the hysteresis loop of the Co-based ribbon. Fig. 2 shows the magnetic flux density and permeability dependent of magnetic field curves the Co-based ribbon.

The broad peaks near $2\theta \approx 45^\circ$ in the X-ray diffraction pattern are evidence of the amorphous structure of the as-cast Co-based ribbon. The Co-based ribbon achieved excellent soft magnetic properties with saturation induction $B_s = 0.55$ T, coercivity $H_C = 4$ A/m, and maximum permeability $\mu_{\max} = 55000$, which is related to the complete crystallization of the α -CoFe (Si) phase in the sample. The Co-based ribbon have potential for use as

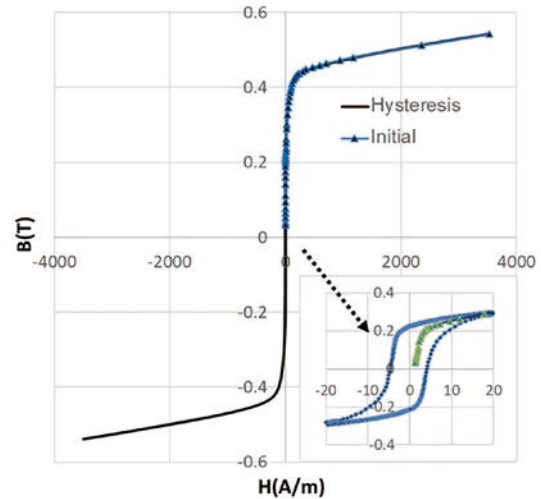


Fig. 1. Hysteresis loop of the Co-based ribbon.

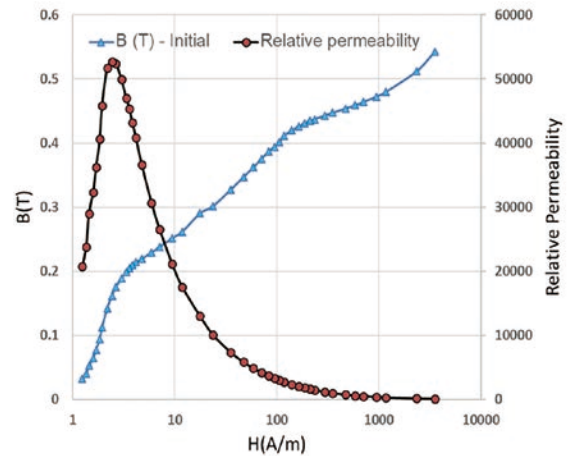


Fig. 2. The magnetic flux density and permeability dependent of magnetic field curves the Co-based ribbon.

highly sensitive magnetic sensors as well as other soft magnetic material applications.

Outputs of the project (publications, presentations, patents)

We are currently summarizing the measured data and plan to present them at the coming international conferences, e.g., 9th International Symposium on Frontiers in Materials Science to be held in November 2026 and then publish them in one of the high-impact international journals in the field of materials science.

Tommaso P. Fraccia

Micro-thermometer composed of DNA liquid crystals

Aim of the research project

We propose to combine the expertise of the applicant, Prof. Tommaso Fraccia, on structures and properties of DNA-LCs, and of the host at Waseda, Prof. Yuka Tabe, on thermomechanical dynamics of cholesteric LCs, to construct an eco-friendly micro-thermometer composed of DNA-LCs, which visualizes temperature distribution in various water solutions.

It is known that a chiral nematic (cholesteric) droplet under a temperature gradient shows a uniform rotation about the gradient axis. So far, the phenomenon has been academically investigated only with cholesteric LCs composed of synthesized hydrophobic compounds, which are harmful to the environment. In this joint research, we propose to replace cholesterics with DNA-LCs and try to realize their steady rotation driven by a temperature gradient.

Because of the self-assembling nature and the biological origin, the DNA device can be used repeatedly for long time without putting any burden on the environment.

The project aims to realize stable DNA-LC cholesteric coacervate microdroplets by complexation of DNA and polycations and subsequently test their behavior under a temperature gradient in the Tabe-lab in Zaiken, which owns a home-made controller to apply a precise temperature gradient to LC samples, attached to a modified microscope.

Then, we examine the dynamics of DNA-LC microdroplets under a temperature gradient, expecting that the thermomechanical coupling originating from the chirality of DNA-LCs should be observed.

Confirming the steady rotation of the DNA-LCs, we then investigate the following properties:

- (1) the relation between the angular velocity ω of the local molecular rotation and the temperature gradient ∇T
- (2) the relation between the rotational direction and the super-molecular structures of the DNA-LCs / the molecular structure of the constituent oligomers
- (3) the dependence of the conversion efficiency from ∇T to ω on the concentrations of the DNA oligomers and of the polycations (Poly-Lysine, Poly-Arginine and Poly-Ammines)

In addition, we should reveal the induced mass flows in the solutions. The temperature gradient possibly causes convective flows of the isolated oligomers and polycations, which may drive

the unidirectional rotation of the DNA-LCs as well. To visualize the flow field, we use Particle Tracking Velocimetry (PTV) method and ascertain the dominant flux to drive the rotation.

Phenomenologically, ω is expected to be linear to ∇T , given as $\omega = v \nabla T$. We measure the thermomechanical coupling constant v under various conditions and optimize the system.

Once the complete correspondence between ω and ∇T under the given condition is obtained, we can construct a micro-thermometer by dispersing the DNA-LC microdroplets in an aqueous solution with unknown temperature distribution. The local rotation of the LC domains gives us the thermal map. Since the size of the DNA-LC microdroplets is typically few-tens of micrometer, the thermal map should possess the same spatial resolution. It can be applied to various aqueous solutions without contaminating and repeatedly used for a long time.

Contents and results of the research

The assembly of DNA-LC cholesteric coacervate microdroplets was achieved through the complexation of DNA with polycations and investigated as a function of various properties of the DNA oligomers, including:

- Length: from 6-mer to 24-mer DNA oligonucleotides;
- End-to-end interactions: blunt-end stacking and pairing of complementary GC and AT dangling ends.

These parameters were found to play a crucial role in determining the phase diagram of the coacervate phase as a function of monovalent salt concentration (NaCl) and temperature (T).

Complex coacervates assembled using the 12-mer DNA oligomer sDD (5'-GCGAATTTCGCGC-3') and poly-L-lysine (PLL, MW 30–70 kDa) were shown to produce stable cholesteric DNA-LC microdroplets (Fig. 1) over a wide range of salt concentrations ($0.75 \text{ M} < [\text{NaCl}] < 0.95 \text{ M}$) and temperatures ($10^\circ \text{C} < T < 45^\circ \text{C}$). This system therefore represents an excellent candidate for investigating temperature-

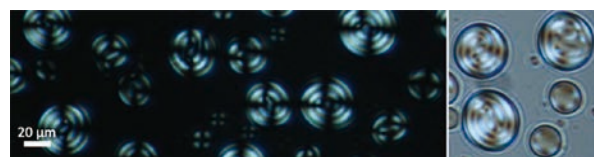


Figure 1 – Polarized optical micrograph of DNA-LC cholesteric coacervate microdroplets obtained in sDD-PLL mixtures at 0.85 M NaCl and $T = 25^\circ \text{C}$. Left: perpendicular polarizers; right: partially de-crossed polarizers.

induced rotation of cholesteric droplets under thermal gradients of varying magnitude.

The planned investigation of the dynamics of DNA-LC microdroplets under a temperature gradient could not be carried out due to unforeseen circumstances that prevented the applicant's visit to the Tabe laboratory in Zaiken.

Outputs of the project (publications, presentations, patents)

The results of the joint project have been partially presented by oral presentations:

Fraccia T. P. "Multiphase liquid-liquid crystalline coacervates" invited seminar at LBE – ESPCI Paris, France on 23/10/2025

Fraccia T. P. "Liquid - liquid crystal phase separation in DNA - polycations mixtures", Report Meeting - ZAIKEN Joint Research Project on 03/03/2026

A manuscript is currently in preparation for publication on an international journal.

奥田 哲治

軌道分子相関を有する強相関電子系物質の基礎物性

研究目的

電子材料の基礎物性の正しい理解は、省エネルギーをもたらし電子・エネルギーデバイスの高性能化、高機能化の実現に必要不可欠である。本共同研究では、光物性や多量体物性の第一人者である勝藤教授と輸送・熱特性評価を専門とする申請者との共同研究により、強相関電子系物質における軌道分子相関に関わる物性を多角的に調査することで、新電子・エネルギー技術をもたらし新物質・新現象発見への道筋を模索する。

具体的には、本共同研究により、強相関電子系酸化物における電荷整列や軌道整列を伴いながらdimerやtrimerなどの多量体を形成しようとする軌道分子相関が、強相関電子系酸化物の熱電特性や光物性に及ぼす影響を、輸送特性、熱特性、光特性など多様な基礎物性評価を行うことで解明する。それにより、優れた熱電材料や、超光速スイッチングを可能とする光誘起相転移現象を示す物質の発見に繋がる、新たな道筋を見出すことを本研究の目的としている。

実験内容と研究成果

物質中で、磁性金属イオンが複数結合し一種の孤立した分子のように振舞う現象が観測される。その最も単純なものがスピン二重項二量体 (dimer) である。dimerでは、初等量子力学で習うように、二つのイオンが、原子軌道が重なる程度まで近づき、二つの軌道状態が結合性軌道と反結合性軌道に再構成され、エネルギーの低い結合性軌道に電子が収容され一つの軌道分子ようになる。結合性軌道の形成による原子間結合は有機物質における原子間結合のメカニズムであるが、孤立分子のように振舞うこのようなdimerの形成も物質における一般的な現象であり、有機物質だけでなく遷移金属酸化物などの無機化合物においても古くから観測され議論されてきた。近年においては、三つ以上のイオンからなる多様な多量体形成が遷移金属酸化物において観測されている。このような孤立多量体を形成しようとするイオン間の相関を、多量体を軌道分子として捉えて、本申請書では「軌道分子相関」と呼ぶことにする。

近年、このような軌道分子相関を持つ多量体物質において、超高速スイッチングの新動作原理として期待される光誘起相転移や、排熱からのエネルギー回収に期待される熱電変換が可能となる優れた熱電特性などの新物性が見出されつつあり、申請者らも幾つかの先駆的な研究成果を上げてきた。例えば、勝藤教授らによって、多量

体物質である $\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x\text{V}_{13}\text{O}_{18}$ (T. Saiki, *et al.*, Phys. Rev. B **96**, 035133 (2017).) や $\text{BaV}_{10}\text{O}_{15}$ (T. Saiki, *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **90**, 024704 (2021).) での光誘起相転移に関する報告が世界に先駆けてなされている。また、申請者も、dimer物質の典型とされる幾つかのTi酸化物において、種々に元素置換した単結晶を育成し、比較的優れた熱電特性を見出してきた。(例えば、R. Takahama, *et al.*, Phys. Rev. Materials **4**, 074401 (2020).) さらに、勝藤教授との共同研究により、ナノ粒子系で光誘起相転移が起こることが報告されているTi酸化物 (S. Ohkoshi, *et al.*, Nat. Chem. **2**, 539 (2010).) の単結晶において、pump光を照射する結晶面の方位に依存する光誘起相転移現象を見出してきた。(T. Saiki, *et al.*, Phys. Rev. B **105**, 075134 (2022).)

以上の背景、実績を踏まえ、本課題では、これまでの勝藤教授との共同研究を基盤として、軌道分子相関を有するより幅広い強相関電子系物質に着目し、新たな光誘起相転移物質や、より優れた熱電特性を有する遷移金属酸化物の探索を行う。特に、本課題においては、軌道分子相関系の光誘起相転移や優れた熱電特性のメカニズム解明を第一の目的として、既存、新規問わず多様な強相関電子系物質に着目し軌道分子相関に関わる基礎物性を多角的に調査することで、新電子・エネルギー技術をもたらし新物質発見への道筋を見出すことを研究の主目的とした。

以上を踏まえて、本年度は、本共同研究課題において、

- (1) 二量体物質 Ti_2O_3 の熱電特性の元素置換効果に関して、これまでに調査してきたMg, V, Cr置換とは明らかに定性的に異なる置換効果を示すAl置換に対して、高置換領域においてクラック等のない良質な大型の単結晶を育成することで、優れた熱電特性を実現する。
- (2) Verwey転移温度以下で特殊なtrimer (trimeron) 形成を示すマグネタイト Fe_3O_4 の元素置換効果に関する研究を発展させ、本系に対して電子ドーピング可能なドーパントを探索し、優れた熱電特性を実現する。

の2点を目標とした。この研究目標に対して、現時点の進捗状況は以下である。

- (1) 高Al置換領域の Ti_2O_3 の大型の単結晶育成に関しては成功していない。その一方、比較的クラックの少ない単結晶は育成でき、高いゼーベック係数を維持したまま電気抵抗率が減少することは確認できた。
- (2) 前年度までに Fe_3O_4 の構造、輸送特性のMg, Al置換効果を調査したが、今年度は、ホール係数などの追加実験を行ないこれまでの実験結果との整合性を確認し

た。また、高価数で置換され電子ドーピングの可能性のあるV, Cr, Mn置換を調査した。残念ながら、これらの置換では室温近傍では、置換に対する抵抗率の減少を観測できなかったが、置換によるVerwey転移消失後に、さらなるMn置換により低温での電気抵抗率の減少を観測できた。格子定数の置換依存からMnは2価で置換されており、Mnの有するd電子が伝導に寄与していることが示唆された。

今年度は、苦戦し、論文、学会発表等の研究成果として

まとめることができなかったが、幾つかの新たな展開の糸口を見出し、また追加実験等も順調に進んでいる。最終年度となる来年度に以上の研究成果を公表していく予定である。

研究成果の公表状況

(論文、国際・国内会議、学会発表、特許等の知財)

なし。

本郷 照久

地熱スケールを原材料とした高機能性材料の合成と物性評価

研究目的

地熱発電設備の通水系内に沈殿・付着するスケールは、伝熱・流動を阻害して発電効率を低下させるとともに、除去・処分に過大なコストを要する。本研究では、この地熱スケールを未利用資源として有効活用し、多孔質発泡ケイカル材、Ca-Al系層状複水酸化物 (LDH)、多孔質シリカなどの高機能性材料へ転換するプロセスを開発することを目的とした。あわせて、得られた材料の構造・物性・機能の評価し、地熱発電設備の長寿命化、周辺環境の浄化、ならびに4Rに資する循環型資源化の可能性を明らかにすることを目指した。

実験内容と研究成果

今年度は、飛騨高山温泉郷の試験井から回収した地熱スケールを対象として、資源化プロセスの基礎検討を行った。まず、XRF、XRD、SEM-EDS等により原料スケールの化学組成、結晶相および微細構造を評価した結果、本スケールはCaおよびSiを主成分とし、炭酸カルシウム系鉱物やケイ酸塩鉱物等を含むことを確認した。これにより、地熱スケールをCa源・Si源として高機能材料へ転換するという研究方針の妥当性を裏付ける基礎データを得た。また、原料スケールの性状把握により、その後の酸抽出条件や材料合成条件を検討するための出発点を明確化することができた。

次に、申請時に計画した酸処理によるCa成分とSi成分の分離を検討した。スケールに対し硝酸水溶液を用いて酸処理を行い、抽出液および残渣を分析した結果、Caを選択的に抽出し、Siを主成分とする残渣を得るための条件を見いだした。この結果は、Ca抽出液およびSi含有残渣をそれぞれ別の高機能材料合成に利用するという当初計画の中核部分を達成したものと位置付けられる。さらに、得られたCa抽出液からはCa-Al系層状複水酸化物 (LDH) を合成し、結晶性が良好でほぼ単相の試料を得ることに成功した (図1)。加えて、ヒ素を対象とした吸着能評価を行い、水質浄化材料として有望であることを確認した。以上より、Ca成分の分離とその有効利用については、材料合成および基礎的な機能評価まで進展させることができた。

また、Ca抽出後の残渣をシリカ源として利用するため、NaOH水溶液によるアルカリ処理を行い、Si成分の溶出挙動を検討した。当初は、残渣中のシリカの大部分が溶解して多孔質シリカ合成に利用可能と想定していたが、実際にはアルカリ処理で溶解するのは一部であり、相当量が不溶

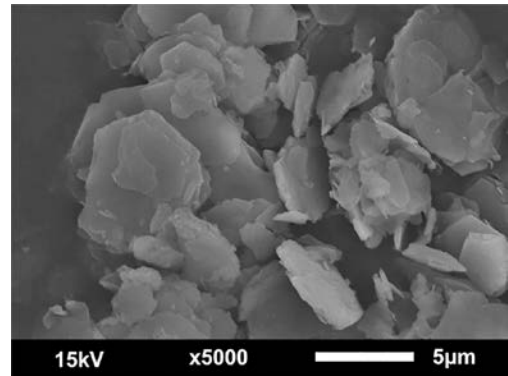


図1 合成したCa-Al LDHのSEM画像

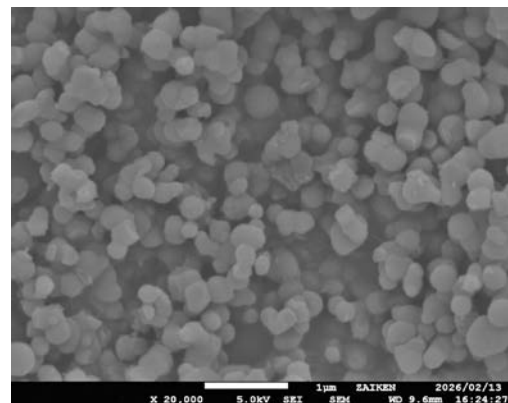


図2 合成した多孔質シリカのSEM画像

解性残渣として残存することが明らかとなった。一方、アルカリ処理液中に溶出したSi成分を用いて多孔質シリカの合成を試みた結果、合成自体は成功し、細孔を有するシリカ材料が得られることを確認した (図2)。したがって、多孔質シリカ合成の可能性は示されたが、細孔構造の設計や高比表面積化に向けた条件最適化は今後の課題である。また、アルカリ処理後に残る不溶性残渣についても、新たな用途を検討する必要性が生じた。これらの結果は、2026年度継続研究において、不溶性残渣の有効利用や多孔質シリカの細孔構造制御を進める必要性として整理されている。

一方、申請時に掲げた多孔質発泡ケイカル材の合成については、今年度は文献調査にとどまり、実験には至らなかった。また、LDHのアルカリ骨材反応劣化抑制材としての評価、多孔質シリカのVOC吸着材・触媒担体等への応用評価も未実施である。さらに、原料スケール中の微量成分については、主成分分析は実施したものの、ヒ素やセ

レン等の微量有害元素を十分に把握するには至らず、今後はICP等による高感度分析が必要である。以上より、今年度は地熱スケールの基礎特性評価、酸処理によるCa/Si分離条件の検討、Ca-Al系LDHの合成と吸着機能評価、多孔質シリカ合成の初期的検討については達成した一方、多孔質発泡ケイカル材の実験的検討や一部用途評価は次年度以降の課題として残された。今年度の成果により、地熱スケールを未利用資源として段階的に高機能材料へ転換するための基礎的知見と、今後の研究展開に向けた課題が明確となった。

研究成果の公表状況

(論文、国際・国内会議、学会発表、特許等の知財)

1. Minghui Pan, Xueke Liu, 安井万奈, 山崎淳司, 本郷照久, 地熱スケールからの有用元素の選択的抽出と機能性材料の合成, 令和7年度廃棄物資源循環学会 関東支部講演会・研究発表会

Farhod Shokir

Development of stable inorganic lead-free halide perovskites for the solar cells

Aim of the research project

Inorganic and organic-inorganic hybrid halide perovskites have attracted extensive attention of researchers around the world for numerous technological applications such as solar cells, catalysts, light emitting diodes (LEDs), lasers, X-ray detectors, photodetectors, and field-effect transistors. Among the several types of clean energy sources available around the world, solar energy is the most promising and efficient system. According to NREL, in recent years, the efficiency of perovskite solar cells (PCE) has increased quite significantly from 3.8% to more than 26.1% [1]. However, these materials exhibit instability under environmental conditions caused by humidity, high temperature and ultraviolet (UV) light irradiation. In addition, the materials used in the light absorption layers of these solar cells typically contain a toxic element, i.e., Pb. Our target of the current project is to find stable lead-free materials for the use in light absorption layer of the perovskite type solar cells, which contribute to all three priority areas proposed in the call for the current project by ZAIKEN, but our major goals are to “replace” conventional Si-based solar cells by a new perovskite type of solar cells and to “replace” toxic Pb by other elements.

[1] <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>

Contents and results of the research

In the current project, we attempted to synthesize lead-free inorganic halide perovskites using the spin-coating method and to analyze their geometric and electronic structures both experimentally and theoretically. To gain a theoretical understanding of the properties of perovskite materials, we performed first-principles calculations within a density functional theory.

The followings have been carried out with Prof. Yamamoto,

- This study uses DFT to analyze the effect of halogen substitution in CsSnI_3 perovskites upon transition to chlorine-containing $\text{CsSnI}_{3-x}\text{Cl}_x$ compositions.

- Partial substitution of iodine with chlorine ($x = 1$) in the β -phase results in a minimum band gap of 0.83–1.33 eV, close to the Shockley–Queisser limit.
- Optical properties are significantly improved: the absorption coefficient in the visible range exceeds 10^5 cm^{-1} , significantly higher than that of the original CsSnI_3 .
- The dependence of the band gap on chlorine concentration is nonlinear due to changes in interatomic distances and the redistribution of electron states.
- Complete halogen substitution leads to the formation of CsSnCl_3 and causes a lattice compression of approximately 10.3%.
- At hydrostatic pressures of 0–30 GPa, compression of the crystal structure and an increase in the elastic modulus are observed.
- Most compounds of the β - CsSnX_3 ($X = \text{I, Br, Cl}$) system retain mechanical stability over the studied pressure range.
- The compound CsSnBr_2Cl exhibits signs of elastic instability at pressures above 20 GPa.
- Pressure promotes a narrowing of the band gap and enhancement of optical absorption, which offers potential for photovoltaic and optoelectronic devices.
- These results indicate the potential of chlorination, doping, and strain engineering to optimize lead-free perovskites for solar energy applications.

Outputs of the project (publications, presentations, patents)

Parts of the results from the current joint project have been published in the international journals [1-3].

- [1] A. Burhonzoda et al., *Comp. Condens. Matter* 46 (2026) e01253
- [2] A. Burhonzoda et al., *Comp. Condens. Matter* 45 (2025) e01130-e01130
- [3] Z. Umar et al., *Comp. Condens. Matter* 44 (2025) e01062

セミソリッド発泡法で作製する発泡アルミニウム合金の 微粒子と初晶粒子の影響を受けた安定化メカニズムの解明

研究目的

熱制御材料、衝撃吸収材、建材に利用される発泡アルミニウム合金は軽量で、消費エネルギーを減少する。作製中、気孔間の壁、セル壁は、さまざまな要因で破膜し、気孔の粗大化を引き起こす。不均一な気孔構造を持つ発泡体は品質が低いため、気孔を微細かつ均一で安定にすることが求められる。先行研究から、添加した微粒子が気液界面の表面エネルギーを下げるため、気孔を安定にすることが知られている。しかし、セル壁で溶湯の排液が発生すると、微粒子のみでは気孔を安定化できない。そこで、発泡体作製には初晶 α 粒子で排液を抑制するセミソリッド発泡法が有効である。一方、発泡剤を用いず、セル壁および内部の排液だけを模した模擬体を用いた事前実験では、初晶 α 粒子によって排液は抑制されたが、気液界面が大きく変形して気孔が安定化しなかった。そのため、気孔の安定化には初晶 α 粒子だけでなく微粒子としての発泡剤が必要であり、双方の気孔安定化メカニズムを組み合わせることが重要であると着想した。本研究は初晶 α 粒子および微粒子の気孔安定化メカニズムを明らかにすることを目的とした。

実験内容と研究成果

発泡アルミニウム合金の気孔安定化に発泡剤という微粒子が必要であると考えられている。しかし、まず発泡剤が発泡体中のどこにどのような状態で存在するか明らかにするため、セミソリッド発泡法にて発泡体を作製した。半凝固状態で固相率13%のAl-6.4mass%Si合金に発泡剤である水素化チタン (TiH_2) 粉末を2 g添加し、インペラで攪拌後、100 s発泡させ、水凝固により発泡体を得た。得られた発泡体の気孔内表面を観察し、また気固界面の元素マッピングを取得した。

図1に示すのは、実際に作製された発泡アルミニウム合金中の気孔内表面、ならびに添加した TiH_2 粉末のSEM像、および各粒子の粒度分布である。図1 (a) および (b) に示すように、気孔内表面には多くの微細な粒子が付着していた。これらの粒子は図1 (c) に示す添加前の水素化チタン粉末を写したSEM像で見られる形状と非常に酷似していることが分かる。また図1 (d) のヒストグラムを見てもおおむね粒度分布が一致していた。図2に示すのは気孔内表面の気固界面を写した元素マッピング像である。COMPO像にて界面に粒子が見られるが、Tiリッチ

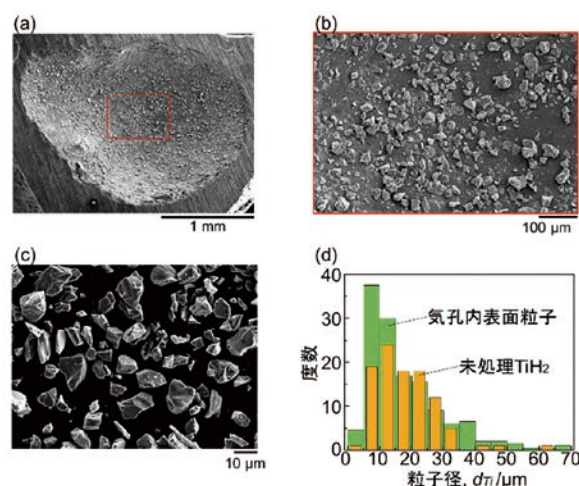


図1 発泡アルミニウム合金中の水素化チタン粒子。(a) 気孔内表面。(b) 気孔内表面拡大図。(c) 添加した水素化チタン粉末。(d) 各粒子の粒度分布図。

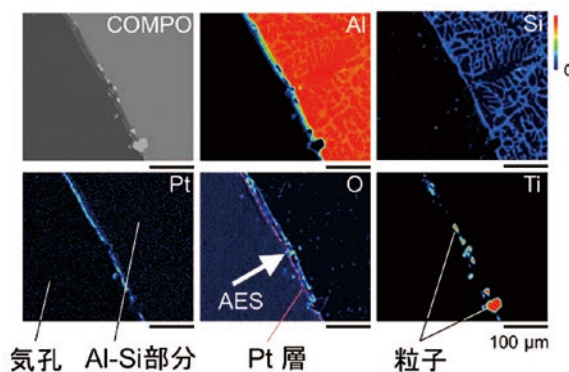


図2 気孔内表面の気孔界面における元素マッピング。

であることが分かる。また白い矢印で示した箇所についてAES分析を行ったところ、自然酸化膜以上の厚みを持つ酸化膜が存在していることが明らかになった。以上から、気孔内表面に付着している粒子はTiリッチであり、発泡アルミニウム合金中に存在するTiは発泡剤として添加した TiH_2 のみであるため、この粒子は発泡剤由来のTi微粒子であると考えられる。

Ti微粒子の有無による安定化メカニズムの違いを明らかにするためには、模擬体を用いた比較実験が必要である。実際の発泡アルミニウム合金では比較実験を行うことは難しいため、模擬体を用いて排液現象を模擬した。30°に傾斜した傾斜冷却板に700℃のAl-6.4mass%Si合金を流し、鋳型に流し込み水凝固することによってAl-Siイ

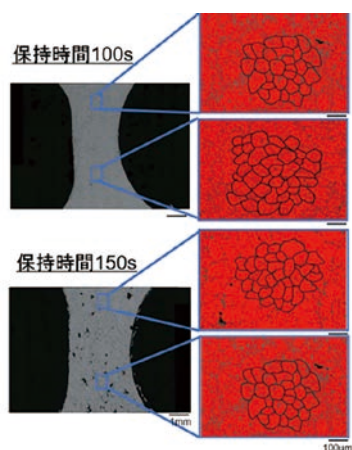


図3 半溶融状態で任意の秒数保持した際の模擬体断面写真。

ンゴットを作製した。インゴットから $20 \times 20 \times 20 \text{ mm}^3$ の立方体を切り出し、上下左右の面にボールエンドミルで穴あけを行い模擬体を作製した。模擬体を半溶融温度となる 613°C で加熱，保持し排液を模擬した。図3に示すのは，模擬体を 613°C で100 sおよび150 s保持した際の模擬体断面写真である。セル壁の形状は変化しなかったが，セル壁中

において初晶粒子が下方に移動し，また粒径がわずかに大きくなった。これは実際の発泡体における排液を模擬しているため，本実験で用いた模擬体は実用可能であると考えられる。

今後，以上の結果を用いて，模擬体のセル壁表面にTi微粒子を付着させて排液を模擬することで，微粒子ならびに初晶粒子どちらの影響も受けた安定化メカニズムを明らかにすることができる考える。

研究成果の公表状況

(論文，国際・国内会議，学会発表，特許等の知財)

- [1] 高松聖美，清山拓夢，奥西優太，土田菜摘，鈴木進補：軽金属学会 第149回秋期大会 講演概要 (2025)，173-174.
- [2] S. Takamatsu, N. Tsuchida and S. Suzuki: MetFoam 2025 (2025), 17.
- [3] S. Takamatsu: ICEIM 2025 (2025), 21.
- [4] S. Takamatsu, N. Tsuchida and S. Suzuki: Key Engineering Materials (Accepted)
- [5] 高松聖美，土田菜摘，鈴木進補：軽金属学会 第148回春期大会 講演概要 (2025)，169-170.

事業報告

2025年度事業報告	136
------------------	-----

2025年度事業報告

1. 2025年度 機械加工運用委員会 装置使用状況

表1 月別装置使用状況

		(時間)												合計
部屋名	使用装置	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月	
加工・試験室	加工機械	25.8	97.0	215.6	286.9	22.3	177.0	411.6	140.3	191.0	163.3	150.8	70.5	1951.8
	試験装置	9.0	0.0	10.5	1.0	0.0	4.0	0.0	8.0	8.0	6.0	13.5	6.0	66.0
共通実験棟	切削機械	111.9	96.0	148.7	129.9	25.4	84.0	154.7	122.7	89.3	27.5	20.5	6.4	1017.1
	電気炉他	319.5	308.0	644.9	1032.2	487.9	431.0	693.0	726.4	922.6	841.0	905.0	680.0	7991.5
合 計		466.2	501.0	1019.7	1450.0	535.6	696.0	1259.3	997.4	1210.9	1037.8	1089.8	762.9	11026.4

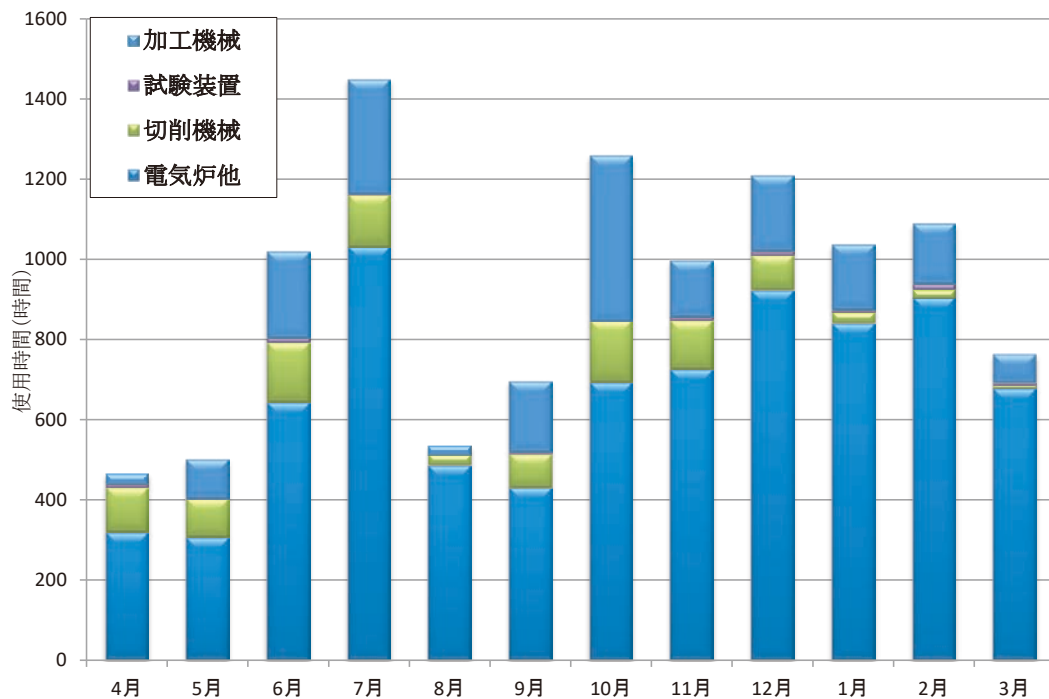


図1 月別装置使用状況

・28研究室（前年度22研究室）による利用があった。

機械加工運用委員会 管理運用装置一覧

加工・試験室

装 置 名	メ ー カ ー	型 番
マシニングセンター（グラフィット仕様）	OKK株式会社	GR400
旋盤	テクノワシノ	LEO-80A
旋盤	テクノワシノ	LR-55A
フライス（タレット型・高精度）	牧野フライス製作所	KVJP-55
フライス（ベット型）	新潟鉄工所	2UMD
フライス（ひざ型・横型）	静岡鉄工所	SP-CH
フライス（ひざ型・NC付）	大隈豊和機械	FMR-30
ボール盤	芦品鉄工	AUD-550
ボール盤	遠州工業	ESD-350DX
ボール盤	富士電動工機	F.B.D-6
平面研削盤（高精度）	岡本工作機械製作所	PSG-63DX
帯鋸盤コンターマシン	ラクソー	L-400
ウォータージェット加工機	コムネット	WAZER
コンピュータ計測制御式万能試験機	島津	AG-100KNC
デジタル計測制御式万能材料試験機	東京衡機	RU300DN-TK21
ビッカース硬さ計	松沢	DVK-2S
微小硬さ計	島津	HMV-2000
ロックウェル硬度計		
万能投影機	ニコン	V-12
マイクロスコープ	マイクロスクエア	DS-400CM-2M

共通実験棟

装 置 名	メ ー カ ー	型 番
ファインカッター（2台）	HEIWA	HS-100
カッティングラインダー	FUTABA	RCK-18
両頭グラインダー	日立工機	KBT10, R12-S
シャーリング	相沢鉄工所	AST-612
NCバンドソー	DAITO	GAⅢ410
サイリスタ式高周波誘導炉（3台）	東芝	3000Hz-100/50/20kg
電気炉（真空ガス置換炉）	デンケン	KDF-V50M
電気炉（大気炉）（2台）	YAMATO	FP410
電気炉（高温用・雰囲気炉）（2台）	デンケン	KDF1700

2. 2025年度 機器分析運用委員会 装置使用状況

表1 月別装置使用状況

使用装置	(時間)												合計
	4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	1月	2月	3月	
電子顕微鏡	396	377	439	636	227	391	671	615	579	411	252	249	5242
試料作製	57	96	80	149	208	140	174	111	321	197	80	134	1747
X線装置	226	205	296	396	163	385	442	421	387	212	134	172	3438
その他装置	521	598	343	573	528	1057	669	922	749	637	367	758	7721
合計	1200	1276	1158	1754	1126	1973	1957	2069	2036	1456	832	1312	18147

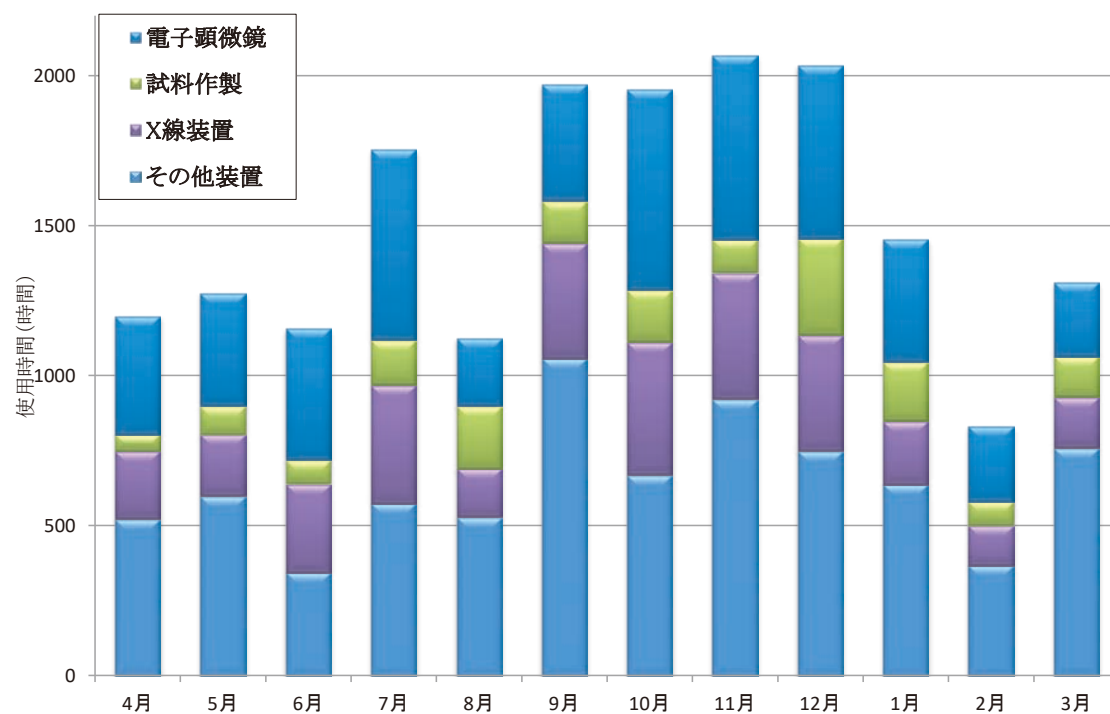


図1 月別装置使用状況

学内46研究室、学外10箇所（大学8、企業2）による利用があった。

学内による総利用時間は17812時間

学外による総利用時間は 335時間（前年度：233.5時間）

文科省共同利用・共同研究拠点として、以下の機関による利用があった。

埼玉工業大学、信州大学、千葉工業大学、東京海洋大学、東京電機大学、東京農工大学、東京理科大学、日本大学、旭化成エレクトロニクス株式会社、株式会社カーボンフライ

機器分析運用委員会 管理運用装置一覧

分析評価設備

装 置 名	メ ー カ ー	型 番
電界放出形透過型電子顕微鏡	JEOL	JEM-2100F
透過型電子顕微鏡（300keV）	JEOL	JEM-3010
透過型電子顕微鏡（200keV）	JEOL	JEM-2010
分析透過電子顕微鏡（120keV）	JEOL	JEM-1400 Flash
（熱）電界放出極低加速走査電子顕微鏡	JEOL	JSM-7800F Prime
（熱）電界放出走査電子顕微鏡	JEOL	JSM-6500F
カソードルミネッセンス分析装置（付属）	Gatan	MONO CL3
（熱）電界放出走査電子顕微鏡	JEOL	JSM-7001F
高分解能走査電子顕微鏡	HITACHI	S-5500
走査電子顕微鏡	JEOL	JSM-6510LA
電子プローブ微小部分分析装置	JEOL	JXA-8230
電界放出型オージェ電子分光装置	JEOL	JAMP-9500F
後方散乱電子線回折装置	TSL	TSL-OIM4
光電子分光装置	JEOL	JPS-9010
フーリエ変換赤外分光システム	PerkinElmer	Spectrum One
ユニバーサル ATR ユニット	PerkinElmer	
拡散反射ユニット	PerkinElmer	
高角度反射ユニット	HARIICK	REFRACTOR2TM
ゲルマニウム ATR ユニット	HARIICK	GATR TM

装 置 名	メ ー カ ー	型 番
動的光散乱式粒径分布測定装置	HORIBA	LB-550
表面粗さ計	Veeco	Dektak 6M
ナノスケールX線構造評価装置	Rigaku	NANO Viewer
全自動水平型多目的X線回折装置	Rigaku	SmartLab
高エネルギー分解能型卓上型X線回折装置	Rigaku	MiniFlex600C+XSPA
ホール効果測定器	Nanometrics	HL5500
キャリア濃度測定器	Nanometrics	PN4300
デジタルマイクロスコプ	KEYENCE	VHX-900
光学顕微鏡（カメラ付き）	Nikon	L150
倒立金属顕微鏡	Nikon	MA200
落射蛍光顕微鏡システム	Olympus	BX51
実体顕微鏡	Nikon 他	
蛍光X線分析装置	JEOL	JSX-1000S

試料加工設備

装 置 名	メ ー カ ー	型 番
集束イオンビーム加工装置（JIB4000）	JEOL	JIB-4000
複合ビーム加工観察装置	JEOL	JIB-4700F
イオンミリング	HITACHI	E-300
イオンポリッシング（クライオシステム搭載）	Gatan	PIPS Model 691
クライオイオンスライサ（クライオシステム搭載）	JEOL	IB-09060CIS
クロスセクションポリシャ	JEOL	CPIV IB-09020CP
平面イオンミリング	SANYUELECTRON	SVM-730
自動研磨機	BUEHLER	オートメット250
ハンディラップ（精密平面研磨機）（6台）	JEOL	HLA-2
ダイヤラップ（卓上半自動研磨機）（3台）	（株）マルトー	ML-150P
ディスクグラインダー	Gatan	Model 623
ディンプルグラインダー	Gatan	Model 656
超音波ディスクカッター	Gatan	Model 601
ディスクパンチ	Gatan	Model 659
多機能ダイヤモンドワイヤーソー	メイワフォーシス	DWS 3500P
カッティング・マシーン		
精密カットグラインダー（2台）	BUEHLER	アイソメット
イオンコーター（Pt）	JEOL	JEC-1600
イオンコーター（Pt）	VACUUM DEVICE	MSP-1S
カーボンコーター	メイワフォーシス	CADE-E
QUICK CARBON COATER	SANYUELECTRON	SC-701CT
プラズマイオンボンバーダ（親水処理装置）	VACUUM DEVICE	PIB-10
イオンクリーナー（2台）	JEOL	JIC-410
プラズマイオンクリーナー	JEOL	EC-52000IC
真空加熱脱泡装置	（株）日伸理化	VM-303D
冷間埋込装置（真空含浸装置）	BUEHLER	カスタム
熱間埋込装置（加熱型油圧埋込気）	BUEHLER	シンプリメット2
サンドブラスト		

3. 大学院生・学部生に対する研究指導

研究員の指導により、大学院学生・学部学生の学位論文・卒業論文に係る実験研究指導を行った。

大学院学生：合計 241名

学部学生：合計 140名

4. 機関誌等の発行

下記の機関誌を発行した。

1)「材研報告」 第81号

2)“ZAIKEN TODAY” No.26, No.27

5. 材研オープンセミナー

現在の研究や生産現場で強い関心を持たれ、かつ学問的にも興味深い材料技術に関わるテーマを取り上げ、第一線の講師陣を組織してセミナーを開催し、広く内外に公開している。

今年度は「構造不規則系の材料科学基礎と新展開」をテーマに11月21日（金）対面およびオンラインによるハイブリッド方式で開催し、114名（対面：59名、オンライン：55名）の参加があった。

6. ZAIKEN Festa

材研及び共同利用・共同研究拠点事業の若手研究者間の相互理解の深化、異分野交流の促進、さらには研究情報発信の推進を図るため、材研OB等企業の方も参加可能なZAIKEN Festa（ポスターセッション）を10月23日（木）に対面で開催、74名（発表者39名、審査員・聴講者等35名）の参加があった。

7. 材料科学連続セミナー

文部科学省の共同利用・共同研究拠点事業の一環として、社会人技術者、若手研究者および大学院生を対象に、材料分野の第一線で活躍する研究者による「材料科学連続セミナー」を、オンラインまたは対面とのハイブリッド方式により開催した。2026年1月に「化学材料第1シリーズ」（全2回）を開催し、延べ157名の参加があった。

8. ZAIKEN CAFÉ

共同利用・共同研究拠点事業として、2024年度より全国の若手研究者によるオンラインのトークカフェを開催。幅広い材料研究の分野の中から毎回2組の若手研究者に最新の研究内容を話してもらい、参加者が材料分野の様々なトピックについて学ぶとともに、講演者にとっても異分野を含む研究者との質疑応答を通じて、研究のさらなる進展と深化を図ることを目的としている。2025年度はオンラインで計6回（7月、10月、11月、12月、1月、2月）開催し、延べ99名の参加があった。

9. ふいご祭

前身の鋳物研究所より続く伝統行事であり、その一年の教職員・学生の安全と研究推進の成果を感謝し、併せて翌年の研究作業の安全衛生と研究開発成果の増大を祈る祭事として、11月28日（金）正午から共通実験棟にて開催、来賓・教職員が多数参列した。

材 研 報 告

第 82 号

2026 年 7 月 31 日 発行

編集人	岩 瀬 英 治 平 田 秋 彦
発行人	菅 原 義 之
発行所	早稲田大学 各務記念材料技術研究所
〒169-0051	東京都新宿区西早稲田 2-8-26 電 話 03-3203-4782
印刷所	株式会社 正 文 社



材 研 報 告

早稲田大学

No.82 2026